91602
new 82-10

ontario hydro
research division

COMPLIMENTARY COPY
Please Credit Ontario Hydro Research If
Reproduced in Whole or in Part

CEMENT PORE WATER NATURAL ANALOGUE
PRELIMINARY REPORT

Report No. 90-208-K

R. DAYAL
Senior Geochemist
and
K.E. EAGLESON
Hydrogeology Technologist
Rock Sciences Section
Civil Research Department

ABSTRACT

A geochemical modelling exercise has been performed to predict aqueous speciation and solubilities of Pb, Ni, Th, and U in the Maqarin Area hyperalkaline water at the specified redox conditions. The results indicate a lack of dependence of aqueous speciation and solubility of Pb, Ni, and Th on the redox condition, whereas U shows a strong dependence. The potential solubility-limiting solid phases have been identified and the corresponding trace element concentrations predicted in the test solution under the given redox conditions.

job	file	date	report no.
44-239, 44-328	841.2	August 29, 1990	90-208-K

91-03184/

TABLE OF CONTENTS

		Page
1.0	INTRODUCTION	3
2.0	DESCRIPTION OF THE MODEL SYSTEM	3
3.0	PROCEDURE	5
4.0	MODELLING RESULTS	5
	4.1 Trace Element Speciation	5
	4.2 Trace Element Solubility	5
5.0	SUMMARY AND CONCLUSIONS	10
6.0	ACKNOWLEDGMENTS	12
	REFERENCES	13
	DISTRIBUTION	last page
	APPENDIX A – Thermodynamic Data Base for Pb, Ni, U, and Th	13

LIST OF TABLES

		Page
Table 1	Chemistry of the Hyperalkaline Water from the Maqarin Area, Jordan	2
Table 2	Model Predictions for Pb(1μ/L) in Maqarin Area Water	4
Table 3	Model Predictions for Ni(1μg/L) in Maqarin Area Water	5
Table 4	Model Predictions for Th(1μg/L) in Maqarin Area Water	6
Table 5	Model Predictions for U(1μg/L) in Maqarin Area Water	7
Table 6	Model Predictions for U, Ni, Pb, and Th(1mg/L; pE = 0) in Maqarin Area Water	9

ontario hydro
research division

To Mr. D.W. Souther
Manager
Nuclear Engineering Department
Design & Development Division - Generation, H10A1

Attention: P.D.Stevens-Guille/S.Naqvi/P.K.M.Rao

CEMENT PORE WATER NATURAL ANALOGUE
PRELIMINARY REPORT

1.0 INTRODUCTION

The hyperalkaline waters of the Maqarin Area, Jordan, exhibit a unique geochemistry, closely representing a cement pore water environment. The site differs from other known occurrences of hyperalkaline discharges in that, like cement pore waters, the high pH values seem to be controlled by portlandite solubility, rather than by the alteration of ultramafic rocks, thereby resulting in pH values around 12.5 (1). Furthermore, the $Ca(OH)_2$-saturated waters are reported to undergo carbonation reactions with CO_2 or HCO_3^-/CO_3^{2-} in the discharge zone, resulting in calcite precipitation.

These unique features of the Maqarin Area waters make it a potential natural analogue for evaluation of cement pore water and grout carbonation reactions which are of particular relevance to the behaviour of C-14 in cement-based engineered barriers (2). Furthermore, given that the bedrock hosts high concentrations of uranium isotopes and other trace elements, the Maqarin Area waters can also be used to evaluate the geochemical behaviour of a wide range of contaminants of interest under high pH conditions, which can result in the repository environment from the use of cement-based engineered barriers.

In addition to the above, the Maqarin Area waters can be used to test whether the predictions, based on existing geochemical codes and thermodynamic data bases, are valid for a hyperalkaline environment, given its high ionic strength and complex solution chemistry. The purpose of this report is to present the preliminary results of a geochemical modelling exercise performed to test the predictions of trace element speciation and solubilities in a hyperalkaline environment. This exercise will also serve as a basis for inter-comparison of modelling results with the other participating organizations involved in the joint AEA (Harwell,U.K.)/NAGRA (Switzerland)/PSI (Switzerland)/Ontario Hydro (Canada) program.

2.0 DESCRIPTION OF THE MODEL SYSTEM

The chemistry of the Maqarin Area hyperalkaline water, used for the modelling exercise in this study, is given in Table 1. As reported by Khoury et al (1), the medium is represented by a highly alkaline natural water (pH = 12.5) of the calcium hydroxide-sulphate type, containing high concentrations

TABLE 1

Chemistry of the Hyperalkaline Water From the Maqarin Area, Jordan

Major Components *	Concentration (mg/L)
Calcium	481.0
Sodium	67.4
Potassium	25.3
Carbonate	30.0
Chloride	76.3
Nitrate	3.1
Sulphate	272.0

* pH = 12.5

of several trace elements. For modelling purposes, the temperature is assumed to be 25°C and, since no redox measurements were performed at the site, pE values of zero (oxidising), -4 (intermediate), and -8 (reducing) are considered.

3.0 PROCEDURE

For the first exercise, the work involved was kept to a minimum. As a starting point, the specified water was "equilibrated" using the geochemical code PHREEQE (3) and the attached thermodynamic data base (Appendix I) with a 1 μg/L concentration level of U, Th, Pb, and Ni, under the given redox conditions (pE = 0, -4, and -8). The dominant solution species at this concentration and varying redox conditions were determined for each trace element, along with the saturation indices for the solid phases of interest. Based on the values of the saturation indices, the potential solubility-limiting solid phase was identified and the corresponding solubility concentration estimated, assuming equilibration with the solid phase, for each trace element under the given redox conditions.

A further simulation was run at a higher concentration level for each trace element under oxidising redox conditions (concentration = 1 mg/L; pE = 0) in order to determine the sensitivity of the modelling results to higher concentration levels of trace elements in the test solution.

Simulations were also carried out to evaluate selenium speciation and solubility in the test solution. However, the solid phases listed for Se in the U.S. Geological Survey thermodynamic data base are limited to only one phase (native selenium). This was found to be inadequate for selenium solubility predictions under the given conditions. As a result, the modelling results for Se are not presented in the report at this time.

4.0 MODELLING RESULTS

4.1 Trace Element Speciation

The preliminary results of the modelling exercise are presented in Tables 2 - 5. Tables 2, 3, and 4 indicate a lack of dependence of Pb, Ni, and Th aqueous speciation on pE. For Ni, the dominant species is $Ni(OH)_3^-$, representing 97% of the total nickel present in solution, while aqueous lead is present predominantly as $Pb(OH)_4^{2-}$ (93%) under the given redox conditions. In the case of Th, $Th(OH)_4$ is the dominant aqueous species, representing 100% of the thorium present in solution.

As expected, the speciation of uranium in solution is strongly dependent on the redox conditions (Table 5), with the effect being most pronounced as the redox condition is varied from oxidising (pE = 0) to slightly reducing (pE = -4). This is clearly reflected in both the distribution and abundance of the principal uranium species in solution. Under oxidising conditions, the dominant solution species is a uranyl carbonate complex, representing 78% of the total uranium in solution. Under both intermediate and strongly reducing conditions, however, a uranium hydroxyl complex appears to dominate the solution phase (100%).

4.2 Trace Element Solubility

For the prediction of trace element solubilities, all simulations were performed at the pH of the test solution and the specified redox conditions. Based on the saturation indices, the potential solubility-limiting phases were identified for each trace element and the given redox conditions, and the corresponding solubility concentrations were estimated.

TABLE 2

Model Predictions for Pb(1µg/L) in Maqarin Area Water

pE	Aqueous Species (%)		Solid Phases	Saturation Index	Calculated Solubility (m)[1]
0	$Pb(OH)_4^{2-}$	93	$Pb(OH)_2$	-2.12	6.43×10^{-7}
	$Pb(OH)_3^-$	7			
-4	$Pb(OH)_4^{2-}$	93	$Pb(OH)_2$	-2.12	6.43×10^{-7}
	$Pb(OH)_3^-$	7			
-8	$Pb(OH)_4^{2-}$	93	$Pb(OH)_2$	-2.12	6.43×10^{-7}
	$Pb(OH)_3^-$	7			

[1] For calculation of solubility concentrations, the solid phases given above are assumed to be solubility-limiting.

TABLE 3

Model Predictions for Ni(1µg/L) in Maqarin Area Water

pE	Aqueous Species (%)	Solid Phases	Saturation Index	Calculated Solubility (m)[1]
0	$Ni(OH)_3^-$ 97 $Ni(OH)_2$ 3	$Ni(OH)_2$	-1.16	2.47×10^{-7}
-4	$Ni(OH)_3^-$ 97 $Ni(OH)_2$ 3	$Ni(OH)_2$	-1.16	2.47×10^{-7}
-8	$Ni(OH)_3^-$ 97 $Ni(OH)_2$ 3	$Ni(OH)_2$	-1.16	2.47×10^{-7}

[1] For calculation of solubility concentrations, the solid phases given above are assumed to be solubility-limiting.

TABLE 4

Model Predictions for Th(1µg/L) in Maqarin Area Water

pE	Aqueous Species (%)	Solid Phases	Saturation Index	Calculated Solubility (m)[1]
0	$Th(OH)_4$ 100	ThO_2	1.24	2.48×10^{-10}
-4	$Th(OH)_4$ 100	ThO_2	1.24	2.48×10^{-10}
-8	$Th(OH)_4$ 100	ThO_2	1.24	2.48×10^{-10}

[1] For calculation of solubility concentrations, the solid phases given above are assumed to be solubility-limiting.

TABLE 5

Model Predictions for U(1µg/L) in Maqarin Area Water

pE	Aqueous Species (%)		Solid Phases	Saturation Index	Calculated Solubility (m)[1]
0	$UO_2(CO_3)_3^{4-}$	78	$U_3O_8(c)$	0.23	3.14×10^{-9}
	$(UO_2)_3(OH)_5^+$	15			
	$UO_2(CO_3)_2^{2-}$	5			
	$U(OH)_5^-$	2			
-4	$U(OH)_5$-	100	uraninite	-3.13	5.69×10^{-6}
-8	$U(OH)_5^-$	100	uraninite	-3.13	5.69×10^{-6}

[1] For calculation of solubility concentrations, the solid phases given above are assumed to be solubility-limiting.

As evident from Tables 2, 3, and 4, Pb, Ni, and Th exhibit a lack of dependence of solubility on the redox conditions, with $Pb(OH)_2$, $Ni(OH)_2$, and ThO_2 being the potential solubility-limiting solid phases under the given redox conditions. Assuming these solid phases to be controlling the trace element concentrations, the Pb, Ni, and Th concentrations in the test solution are predicted to be 6.43 x 10^{-7} M, 2.46 x 10^{-7} M, and 2.48 x 10^{-10} M, respectively.

The effect of varying redox conditions on solubility is most evident in the case of uranium (Table 5). Under oxidising conditions, the test solution appears to be slightly oversaturated with respect to the solid phases U_3O_8(c), beta-$UO_2(OH)_2$, and schoepite. Assuming U_3O_8(c) to be the solubility-limiting solid phase, the uranium concentration in the test solution is predicted to be 3.14 x 10^{-9} M. At the redox conditions of pE = – 4 and –8, the test solution shows significant undersaturation, relative to uraninite. Assuming uraninite to be the solubility-limiting phase under these redox conditions, the uranium concentration in the test solution is calculated to be 5.69 x 10^{-6} M. In other words, under reducing conditions, the test solution can hold a uranium concentration of up to three orders of magnitude higher than that under oxidising conditions.

The modelling results at the higher trace element concentration level (1 mg/L) and oxidising redox condition (pE = 0) are summarized in Table 6. Compared to the test solution characterized by low trace element concentration and oxidising redox condition, the results in Table 6 indicate that, at the higher concentration level, the test solution is slightly oversaturated or near-saturation with respect to the nickel and lead solid phases, bunsenite and $Pb(OH)_2$, respectively. This is not surprising, considering the orders of magnitude increase in the concentrations of nickel and lead in the test solution at the higher concentration level. The predominant aqueous species of both lead and nickel present in the test solution remain unaffected.

At the higher concentration level of uranium, the test solution is relatively more oversaturated with respect to schoepite and beta-UO_2(OH), but slightly undersaturated or near-saturation relative to the solubility of UO_3(c). Furthermore, the dominant uranium species in the solution phase is a uranyl hydroxyl complex (97%), compared to the predominance of a uranyl carbonate complex at the low concentration level.

As expected, in the case of thorium, the test solution is grossly oversaturated with respect to the solid phase ThO_2. This is not surprising considering that ThO_2 is the solubility-limiting phase for thorium in the test solution, even at the low concentration level.

5.0 SUMMARY AND CONCLUSIONS

A geochemical modelling exercise has been performed using PHREEQE to predict aqueous speciation and solubilities of the trace elements Pb, Ni, Th, and U in the Maqarin Area hyperalkaline water at the specified redox conditions.

Preliminary results indicate a lack of dependence of aqueous speciation and solubility of Pb, Ni, and Th on the given redox conditions.

Assuming $Pb(OH)_2$, $Ni(OH)_2$, and ThO_2 to be the solubility-limiting phases under the given conditions, the Pb, Ni, and Th solubility concentrations in the test solution are predicted to be 6.43 x 10^{-7} M, 2.46 x 10^{-7} M, and 2.48 x 10^{-10} M, respectively.

Both the aqueous speciation and solubility of U are strongly dependent on the redox conditions, with the effect being most pronounced as the redox potential is varied from oxidising to slightly reducing.

TABLE 6

Model Predictions for U, Ni, Pb,
and Th(1mg/L; pE = 0) in Maqarin Area Water

Aqueous Species (%)		Solid Phases	Saturation Index	Calculated Solubility (m)[1]
URANIUM				
$(UO_2)_3(OH)_5^+$	97	$UO_3(c)$	-0.34	4.21×10^{-5}
$UO_2(CO_3)_3^{4-}$	3			
NICKEL				
$Ni(OH)_3^-$	97	Bunsenite	0.19	1.10×10^{-5}
$Ni(OH)_2$	3			
LEAD				
$Pb(OH)_4^{2-}$	97	$Pb(OH)_2$	0.88	6.44×10^{-7}
$Pb(OH)_3^-$	3			
THORIUM				
$Th(OH)_4$	100	$Th(OH)_4$	-2.06	4.96×10^{-4}

[1] For calculation of solubility concentrations, the solid phases given above are assumed to be solubility-limiting.

While the dominant U solution species under oxidising conditions is a uranyl carbonate complex, a uranium hydroxyl complex appears to dominate the solution phase under reducing conditions.

Assuming $U_3O_8(c)$ to be the solubility-limiting phase under oxidising conditions, the U concentration in the test solution is estimated to be 3.14×10^{-9} M. Under reducing conditions, however, the solubility concentration is predicted to be 5.69×10^{-6} M, assuming uraninite to be the solubility-limiting phase.

As expected, the test solution at the higher trace element concentration level and oxidising redox condition is generally oversaturated relative to the solid phases controlling the trace element solubilities at the low concentration level. Among the trace elements studied, only U solution speciation is significantly affected at the higher concentration level.

Comparison of the modelling results with laboratory-derived data on trace element concentrations in a cementitious environment should help establish the validity of the Maqarin site as a natural analogue for a cement pore water system.

The next phase of the study will involve an inter-comparison of modelling results of the other organizations participating in the joint program. Furthermore, a comparison of the predicted chemistry with the observed trace element chemical behaviour will allow validation of the models.

Additional simulations need to be carried out to evaluate the geochemical behaviour of other trace elements of interest under high pH conditions.

In the present study, no ionic strength corrections were made for calculation of trace element speciation and solubilities. At a later date, a Pitzer-PHREEQE version will be used to evaluate the effect of high ionic strength on the modelling results.

6.0 ACKNOWLEDGMENTS

Funding for this project was provided jointly by the Nuclear Engineering Department and the Civil Research Department.

Approved by:

T.W. Klym
Manager
Civil Research Department

Prepared by:

R. Dayal
Senior Geochemist
Rock Sciences Section
Civil Research Department

K.E. Eagleson
Hydrogeology Technologist
Rock Sciences Section
Civil Research Department

Reviewed by:

A.T. Jakubick
Supervising Engineer
Rock Sciences Secton
Civil Research Department

RD/KEE:kl

REFERENCES

1. Dayal, R., Johnston, H.M., and Zhou, Z., 1989. Reactor Operating Waste Disposal Program -1989 Progress Report. Ontario Hydro Research Division Report No. 89-226-K.

2. Khoury, H.N., Salameh, E., and Abdul-Jaber, Q., 1985. Characteristics of an Unusual Highly Alkaline Water from the Maqarin Area, Northern Jordan. Jour. Hydrology, 81, 79-91.

3. Parkhurst, D.L., Thorstenson, D.C., and Plummer, L.N., 1985. PHREEQE - A Computer Program for Geochemical Calculations. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations 80-96, NTIS Tech. Report PB81-167801, 1980, revised 1985.

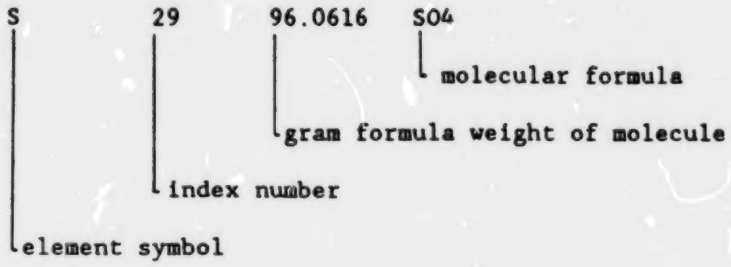
APPENDIX I

Thermodynamic Data Base for Pb, Ni, U, and Th

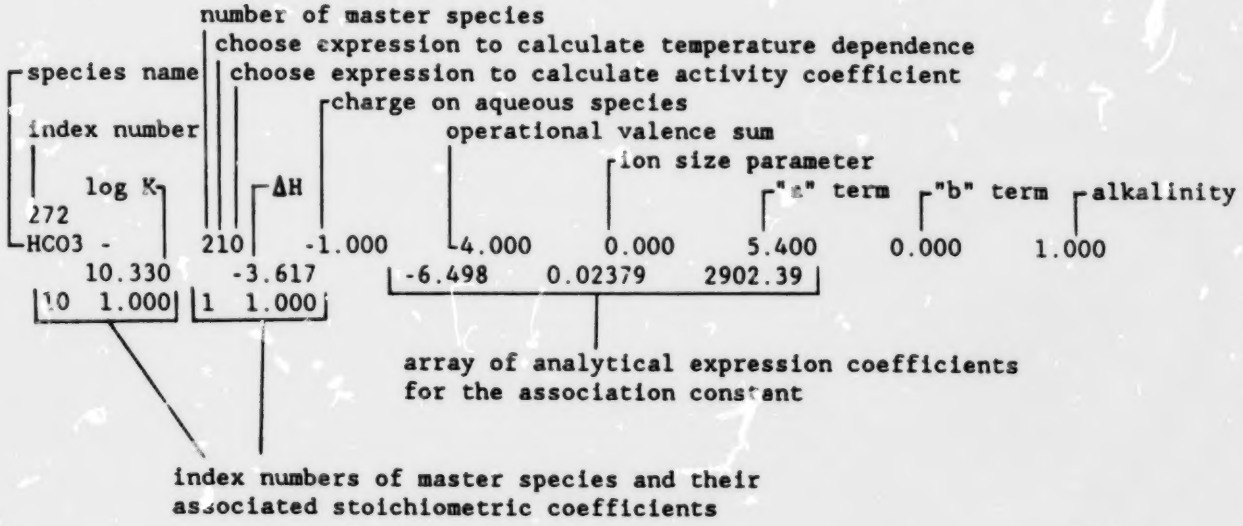
Source of the Data Base

1. All elements except Th – U.S. Geological Survey
2. Th – CHEMVAL/MIRAGE project (Commission of the European Communities)

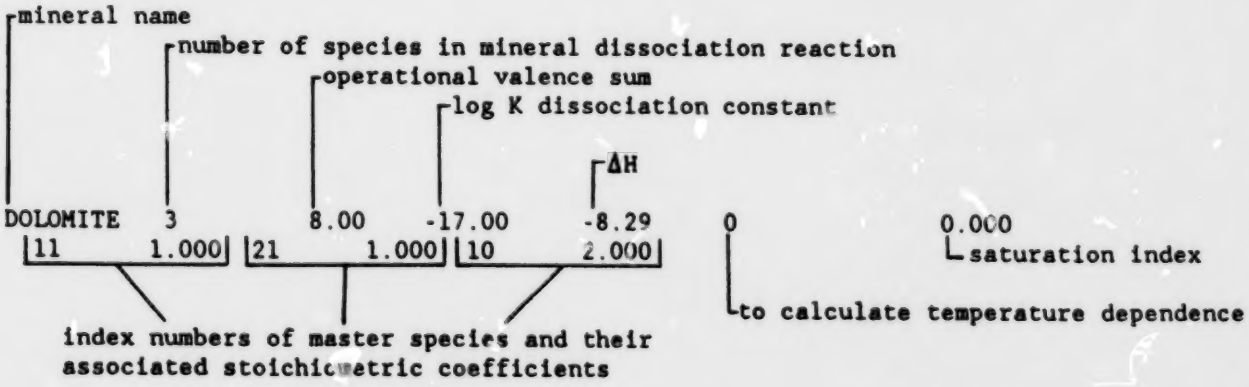
ELEMENTS



SPECIES



LOOK MIN


mineral name
number of species in mineral dissociation reaction
operational valence sum
log K dissociation constant
ΔH
DOLOMITE 3 8.00 -17.00 -8.29 0 0.000
11 1.000 21 1.000 10 2.000
saturation index
to calculate temperature dependence
index numbers of master species and their
associated stoichiometric coefficients

```
ELEMENTS
AG          4      107.8680    AG
AL          5       26.9815    AL
AS          6      141.9431    H3ASO4
B           7       61.8331    H3BO3
BA          8      137.3400    BA
BR          9       79.9040    BR
C          10       60.0094    CO3
CA         11       40.0800    CA
CD         12      112.3994    CD
CL         13       35.4530    CL
CS         14      132.9050    CS
CU         15       63.5460    CU+2
F          16       18.9984    F
FE         17       55.8470    FE+2
I          18      126.9044    I
K          19       39.1020    K
LI         20        6.9390    LI
MG         21       24.3120    MG
MN         22       54.9380    MN+2
N          23       62.0049    NO3
NA         24       22.9898    NA
NI         25       58.7100    NI
P          26       94.9714    PO4
PB         27      207.1899    PB
RB         28       85.4699    RB
S          29       96.0616    SO4
SI         30       96.1155    H4SIO4
SR         31       87.6200    SR
U          32      270.0278    UO2+2
V          33       82.9390    VO2+1
ZN         34       65.3699    ZN
MO         35      159.9376    MOO4-2
ND         36      144.24      ND+3
SE         37     127.96610    HSEO3 -
TH         38     232.0381     TH+4

SPECIES
  1
H+              100      1.000      0.000      0.000      9.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
  1   1.000
  2
E-              100     -1.000     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
  2   1.000
  3
H2O             100      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
  3   1.000
  4
AG+             100      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
  4   1.000
  5
AL 3+           100      3.000      0.000      0.000      9.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
  5   1.000
  6
H3ASO4          100      0.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
      0.000      0.000
  6   1.000
  7
H3BO3          100      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
  7   1.000
  8
BA 2+          100      2.000      0.000      0.000      5.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
  8   1.000
  9
BR-            100     -1.000      0.000      0.000      4.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
  9   1.000
 10
CO3 2-         100     -2.000      4.000      0.000      5.400      0.000      2.000
      0.000      0.000
 10   1.000
 11
CA 2+          101      2.000      0.000      0.000      6.000      0.165      0.000
      0.000      0.000
 11   1.000
 12
CD 2+          100      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 12   1.000
 13
CL-            101     -1.000      0.000      0.000      3.000      0.015      0.000
      0.000      0.000
 13   1.000
 14
CS+            100      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 14   1.000
 15
CU 2+          100      2.000      2.000      0.000      6.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 15   1.000
 16
F-             100     -1.000      0.000      0.000      3.500      0.000      0.000
      0.000      0.000
 16   1.000
 17
FE 2+          100      2.000      2.000      6.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 17   1.000
 18
I-             100     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 18   1.000
 19
K+             101      1.000      0.000      0.000      3.000      0.015      0.000
      0.000      0.000
 19   1.000
 20
LI+            100      1.000      0.000      0.000      6.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 20   1.000
 21
MG 2+          101      2.000      0.000      0.000      6.500      0.200      0.000
```

```
      0.000      0.000
 21   1.000
 22
MN 2+          100      2.000      2.000      0.000      6.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 22   1.000
 23
NO3 -          100     -1.000      5.000      0.000      3.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 23   1.000
 24
NA+            101      1.000      0.000      0.000      4.000      0.075      0.000
      0.000      0.000
 24   1.000
 25
NI 2+          100      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 25   1.000
 26
PO4 3-         100     -3.000      0.000      0.000      5.000      0.000      2.000
      0.000      0.000
 26   1.000
 27
PB 2+          100      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 27   1.000
 28
RB+            100      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 28   1.000
 29
SO4 2-         101     -2.000      6.000      0.000      4.000     -0.040      0.000
      0.000      0.000
 29   1.000
 30
H4SIO4         100      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 30   1.000
 31
SR 2+          100      2.000      0.000      0.000      5.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 31   1.000
 32
UO2 2+         100      2.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 32   1.000
 33
VO2 1+         100      1.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 33   1.000
 34
ZN 2+          100      2.000      0.000      0.000      6.000      0.000      0.000
      0.000      0.000
 34   1.000
 35
MOO4 2-        100     -2.0        0.0        4.5                              0.0
       0.0        0.0
 35   1.0
 36
ND 3+          100      3.0        0.0        0.0                              0.0
```

```
      0.0        0.0
 36  1.0
 37
HSEO3 -       100     -1.000      4.000      2.900      0.000      0.000      0.000
      8.320     -1.280  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 37  1.000
 38
TH 4+         100      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.0        0.0
 38  1.000
 51
H3ASO3        400      0.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     19.444    -30.015
  6  1.000   2  2.000   1  2.000   3 -1.000
 52
CU+           200      1.000      1.000      0.000      2.500      0.000      0.000
      2.720     1.650
 15  1.000   2  1.000
 53
FE 3+         200      3.000      3.000      9.000      0.000      0.000      0.000
    -13.032    10.000
 17  1.000   2 -1.000
 54
MN 3+         200      3.000      3.000      0.000      9.000      0.000      0.000
    -25.507    25.760
 22  1.000   2 -1.000
 55
NH4 +         400      1.000     -3.000      0.000      2.500      0.000      0.000
    119.077   -187.055
 23  1.000   3 -3.000   1 10.000   2  8.000
 56
NO2 -         400     -1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     28.570    -43.760
 23  1.000   1  2.000   2  2.000   3 -1.000
 57
HS-           400     -1.000     -2.000      0.000      3.500      0.000      1.000
     33.660    -60.140
 29  1.000   1  9.000   2  8.000   3 -4.000
 58
SO3 2-        400     -2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     -3.650    -2.900
 29  1.000   1  2.000   2  2.000   3 -1.000
 59
U 3+          400      3.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.420    -10.030
 32  1.000   2  3.000   1  4.000   3 -2.000
 60
U 4+          400      4.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      9.216    -34.430
 32  1.000   2  2.000   1  4.000   3 -2.000
 61
UO2 +         200      1.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      2.785    -3.300
 32  1.000   2  1.000
 62
V 2+          400      2.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     18.380    -35.330
 33  1.000   2  3.000   1  4.000   3 -2.000
 63
V 3+          400      3.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
    22.610   -44.230
 33  1.000  2  2.000  1  4.000  3 -2.000
 64
VO 2+          400      2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    16.930   -29.320
 33  1.000  2  1.000  1  2.000  3 -1.000
 65
OH-            200     -1.000      0.000      0.000      3.500      0.000      1.000
   -13.998    13.345
  3  1.000  1 -1.000
 66
H3SIO4 -       210     -1.000      0.000      0.000      4.000      0.000      1.000
    -9.930     8.935      6.368  -0.016346    -3405.9
 30  1.000  1 -1.000
 67
H2SIO4--       210     -2.000      0.000      0.000      5.400      0.000      2.000
   -21.619    29.714     39.478  -0.065927    -12355.1
 30  1.000  1 -2.000
 68
SIF6 2-        400     -2.000      0.000      0.000      5.000      0.000      0.000
    30.180   -16.260
 30  1.000 16  6.000  1  4.000  3 -4.000
 69
H2BO3 -        200     -1.000      0.000      0.000      2.500      0.000      1.000
    -9.240     3.224
  7  1.000  1 -1.000
 70
BF(OH)3-       200     -1.000      0.000      0.000      2.500      0.000      0.000
    -0.399     1.850
  7  1.000 16  1.000
 71
BF2(OH)2       400     -1.000      0.000      0.000      2.500      0.000      0.000
     7.630     1.635
  7  1.000 16  2.000  3 -1.000  1  1.000
 72
BF3OH -        400     -1.000      0.000      0.000      2.500      0.000      0.000
    13.667    -1.580
  7  1.000 16  3.000  3 -2.000  1  2.000
 73
BF4 -          400     -1.000      0.000      0.000      2.500      0.000      0.000
    20.274    -1.795
  7  1.000 16  4.000  3 -3.000  1  3.000
 74
NH3 AQ         410      0.000     -3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   109.825  -174.575      0.6322   -0.001225    -2835.76
  1  9.000 23  1.000  3 -3.000  2  8.000
 75
NH4SO4 -       500     -1.000      3.000      0.000      5.000      0.000      0.000
   120.187  -187.055
 29  1.000 23  1.000  3 -3.000  1 10.000  2  8.000
 76
MGOH +         310      1.000      0.000      0.000      6.500      0.000      0.000
   -11.790    15.935     -3.53     0.00513     -2917.1
 21  1.000  3  1.000  1 -1.000
 77
MGF +          200      1.000      0.000      0.000      4.500      0.000      0.000
     1.820     4.674
 21  1.000 16  1.000
 78
MGCO3 AQ       210      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      2.000
```

```
     2.980      2.022       0.991     0.00667
 21  1.000 10  1.000
 79
MGHCO3 +     310      1.000      4.000      0.000      4.000      0.000      1.000
    11.400     -2.430     -4.179   0.012734       2902.39  2.29812E-05
 21  1.000 10  1.000  1  1.000
 80
MGSO4 AQ     200      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     2.250      1.399
 21  1.000 29  1.000
 81
MGPO4 -      200     -1.000      0.000      0.000      5.400      0.000      0.000
     6.589      3.100
 21  1.000 26  1.000
 82
MGH2PO4      300      1.000      0.000      0.000      5.400      0.000      0.000
    21.066     -1.120
 21  1.000 26  1.000  1  2.000
 83
MGHPO4 A     300      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    15.220     -0.230
 21  1.000 26  1.000  1  1.000
 84
CAOH +       300      1.000      0.000      0.000      6.000      0.000      0.000
   -12.598     14.535
 11  1.000  3  1.000  1 -1.000
 85
CAHCO3 +     310      1.000      4.000      0.000      6.000      0.000      1.000
    11.330      1.790     -9.448    0.03709    2902.39
 11  1.000 10  1.000  1  1.000
 86
CACO3 AQ     210      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      2.000
     3.150      4.030    -27.393     0.05617      4114.0
 11  1.000 10  1.000
 87
CASO4 AQ     200      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     2.309      1.470
 11  1.000 29  1.000
 88
CAHPO4 A     300      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    15.085     -0.230
 11  1.000 26  1.000  1  1.000
 89
CAPO4 -      200     -1.000      0.000      0.000      5.400      0.000      0.000
     6.459      3.100
 11  1.000 26  1.000
 90
CAH2PO4      300      1.000      0.000      0.000      5.400      0.000      0.000
    20.960     -1.120
 11  1.000 26  1.000  1  2.000
 91
CAF +        200      1.000      0.000      0.000      5.000      0.000      0.000
     0.940      3.798
 11  1.000 16  1.000
 92
NACO3 -      200     -1.000      4.000      0.000      5.400      0.000      2.000
     1.268      8.911
 24  1.000 10  1.000
 93
NAHCO3 A     300      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      1.000
```

```
    10.080      0.000
 24  1.000 10  1.000  1  1.000
 94
NASO4 -      200     -1.000      6.000      0.000      5.400      0.000      0.000
     0.700      1.120
 24  1.000 29  1.000
 95
NAHPO4 -     300     -1.000      0.000      0.000      5.400      0.000      0.000
    12.636      0.000
 24  1.000 26  1.000  1  1.000
 96
NAF AQ       200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -0.790      0.000
 24  1.000 16  1.000
 97
KSO4 -       210     -1.000      6.000      0.000      5.400      0.000      0.000
     0.850      2.250       3.106       0.0          -673.6
 19  1.000 29  1.000
 98
KHPO4 -      300     -1.000      0.000      0.000      5.400      0.000      0.000
    12.640      0.000
 19  1.000 26  1.000  1  1.000
 99
ALOH 2+      300      2.000      0.000      0.000      5.400      0.000      0.000
    -4.990     11.899
  5  1.000  3  1.000  1 -1.000
100
AL(OH)2+     300      1.000      0.000      0.000      5.400      0.000      0.000
   -10.100      0.000
  5  1.000  3  2.000  1 -2.000
101
AL(OH)4-     300     -1.000      0.000      0.000      4.500      0.000      1.000
   -23.000     44.060
  5  1.000  3  4.000  1 -4.000
102
ALF 2+       200      2.000      0.000      0.000      5.400      0.000      0.000
     7.010      0.000
  5  1.000 16  1.000
103
ALF2 +       200      1.000      0.000      0.000      5.400      0.000      0.000
    12.750     20.000
  5  1.000 16  2.000
104
ALF3 AQ      200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    17.020      2.500
  5  1.000 16  3.000
105
ALF4 -       200     -1.000      0.000      0.000      4.500      0.000      0.000
    19.720      0.000
  5  1.000 16  4.000
106
ALSO4 +      200      1.000      6.000      0.000      4.500      0.000      0.000
     3.020      2.150
  5  1.000 29  1.000
107
AL(SO4)2     200     -1.000     12.000      0.000      4.500      0.000      0.000
     4.920      2.840
  5  1.000 29  2.000
108
AL(OH)3      300      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
   -16.000      0.000
  5  1.000  3  3.000  1 -3.000
109
FEOH +       300      1.000      2.000      0.000      0.000      0.000      1.000
    -9.500     13.199
 17  1.000  3  1.000  1 -1.000
110
FEOH3 -1     300     -1.000      2.000      0.000      0.000      0.000      3.000
   -31.000     30.300
 17  1.000  3  3.000  1 -3.000
111
FESO4 AQ     200      0.000      8.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     2.250      3.230
 17  1.000 29  1.000
112
FEH2PO4      300      1.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    22.253     -4.520
 17  1.000 26  1.000  1  2.000
113
FEOH2 AQ     300      0.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -20.570     28.565
 17  1.000  3  2.000  1 -2.000
114
FEHPO4 A     300      0.000      2.000      0.000      0.000      0.000      1.000
    15.946     -3.530
 17  1.000 26  1.000  1  1.000
115
FE(HS)2      500      0.000     -2.000      0.000      0.000      0.000      2.000
    76.270   -120.280
 17  1.000 29  2.000  1 18.000  2 16.000  3 -8.000
116
FE(HS)3      500     -1.000     -4.000      0.000      0.000      0.000      3.000
   111.937   -180.420
 17  1.000 29  3.000  1 27.000  2 24.000  3-12.000
117
FEOH 2+      400      2.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -15.222     20.399
  3  1.000  1 -1.000 17  1.000  2 -1.000
118
FEHPO4 +     400      1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     4.748     12.230
 26  1.000  1  1.000 17  1.000  2 -1.000
119
FESO4 +      300      1.000      9.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -9.112     13.910
 29  1.000 17  1.000  2 -1.000
120
FECL 2+      300      2.000      3.000      0.000      5.000      0.000      0.000
   -11.552     15.600
 13  1.000 17  1.000  2 -1.000
121
FECL2 +      300      1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -10.902     10.000
 13  2.000 17  1.000  2 -1.000
122
FECL3 AQ     300      0.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -11.902     10.000
 13  3.000 17  1.000  2 -1.000
123
FEOH2 +      400      1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
   -18.702     26.900
  3  2.000  1 -2.000 17  1.000  2 -1.000
124
FEOH3 AQ     400      0.000      3.000      0.000      0.000      0.000      1.000
   -26.632     37.000
  3  3.000  1 -3.000 17  1.000  2 -1.000
125
FEOH4 -      400     -1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      2.000
   -34.632     42.500
  3  4.000  1 -4.000 17  1.000  2 -1.000
126
FEH2PO4      400      2.000      3.000      0.000      5.400      0.000      0.000
    11.948      5.480
 26  1.000  1  2.000 17  1.000  2 -1.000
127
FEF 2+       300      2.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -6.833     12.699
 16  1.000 17  1.000  2 -1.000
128
FEF2 +       300      1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -2.232     14.800
 16  2.000 17  1.000  2 -1.000
129
FEF3 AQ      300      0.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     0.968     15.399
 16  3.000 17  1.000  2 -1.000
130
FE(SO4)2     300     -1.000     15.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -7.612     14.600
 29  2.000 17  1.000  2 -1.000
131
FE2(OH)2     400      4.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -29.014     33.500
  3  2.000  1 -2.000 17  2.000  2 -2.000
132
FE3(OH)4     400      5.000      9.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -45.396     44.300
  3  4.000  1 -4.000 17  3.000  2 -3.000
133
LISO4 -      200     -1.000      6.000      0.000      5.000      0.000      0.000
     0.640      0.000
 20  1.000 29  1.000
134
SROH +       300      1.000      0.000      0.000      5.000      0.000      0.000
   -13.178     14.495
 31  1.000  3  1.000  1 -1.000
135
BAOH +       300      1.000      0.000      0.000      5.000      0.000      0.000
   -13.358     15.095
  8  1.000  3  1.000  1 -1.000
136
MNCL +       200      1.000      2.000      0.000      5.000      0.000      0.000
     0.607      0.000
 22  1.000 13  1.000
137
MNCL2 AQ     200      0.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     0.041      0.000
 22  1.000 13  2.000
138
MNCL3 -      200     -1.000      2.000      0.000      5.000      0.000      0.000
```

```
    -0.305      0.000
 22  1.000 13  3.000
139
MNOH +        300      1.000      2.000      0.000      5.000      0.000      0.000
   -10.590     14.399
 22  1.000  3  1.000  1 -1.000
140
MN(OH)3       300     -1.000      2.000      0.000      5.000      0.000      0.000
   -34.800      0.000
 22  1.000  3  3.000  1 -3.000
141
MNF +         200      1.000      2.000      0.000      5.000      0.000      0.000
     0.850      0.000
 22  1.000 16  1.000
142
MNSO4 AQ      200      0.000      8.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     2.260      2.170
 22  1.000 29  1.000
143
MN(NO3)2      200      0.000     12.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     0.600     -0.396
 22  1.000 23  2.000
144
MNHCO3 +      300      1.000      6.000      0.000      5.000      0.000      1.000
    11.600      0.000
 22  1.000 10  1.000  1  1.000
145
CUCL2 -       300     -1.000      1.000      0.000      4.000      0.000      0.000
     8.220      1.230
 13  2.000 15  1.000  2  1.000
146
CUCL3 2-      300     -2.000      1.000      0.000      5.000      0.000      0.000
     8.420      1.910
 13  3.000 15  1.000  2  1.000
147
CUCO3 AQ      200      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      2.000
     6.730      0.000
 15  1.000 10  1.000
148
CU(CO3)2      200     -2.000     10.000      0.000      0.000      0.000      4.000
     9.830      0.000
 15  1.000 10  2.000
149
CUCL +        200      1.000      2.000      0.000      4.000      0.000      0.000
     0.430      8.650
 15  1.000 13  1.000
150
CUCL2 AQ      200      0.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     0.160     10.560
 15  1.000 13  2.000
151
CUCL3 -       200     -1.000      2.000      0.000      4.000      0.000      0.000
    -2.290     13.690
 15  1.000 13  3.000
152
CUCL4 2-      200     -2.000      2.000      0.000      5.000      0.000      0.000
    -4.590     17.780
 15  1.000 13  4.000
153
CUF +         200      1.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
     1.260      1.620
 15  1.000 16   1.000
154
CUOH +       300      1.000      2.000      0.000      4.000      0.000      0.000
    -8.000      0.000
 15  1.000  3   1.000  1 -1.000
155
CU(OH)2      300      0.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -13.680      0.000
 15  1.000  3   2.000  1 -2.000
156
CU(OH)3      300     -1.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -26.899      0.000
 15  1.000  3   3.000  1 -3.000
157
CU(OH)4      300     -2.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -39.600      0.000
 15  1.000  3   4.000  1 -4.000
158
CU2(OH)2     310      2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000     C
   -10.359     17.539       2.497         0.0       -3833.0
 15  2.000  3   2.000  1 -2.000
159
CUSO4 AQ     200      0.000      8.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     2.310      1.220
 15  1.000 29   1.000
160
CU(HS)3      500     -1.000     -4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   126.879   -180.420
 15  1.000 29   3.000  1 27.000  2 24.000  3-12.000
161
CUHCO3 +     300      1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      1.000
    13.000      0.000
 15  1.000 10   1.000  1  1.000
162
ZNCL +       200      1.000      0.000      0.000      4.000      0.000      0.000
     0.430      7.790
 34  1.000 13   1.000
163
ZNCL2 AQ     200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     0.450      8.500
 34  1.000 13   2.000
164
ZNCL3 -      200     -1.000      0.000      0.000      4.000      0.000      0.000
     0.500      9.560
 34  1.000 13   3.000
165
ZNCL4 2-     200     -2.000      0.000      0.000      5.000      0.000      0.000
     0.199     10.960
 34  1.000 13   4.000
166
ZNF +        200      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     1.150      2.220
 34  1.000 16   1.000
167
ZNOH +       300      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -8.980     13.399
 34  1.000  3   1.000  1 -1.000
168
ZN(OH)2      300      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
   -16.899     20.800
 34  1.000  3  2.000  1 -2.000
169
ZN(OH)3      300     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -28.399     29.300
 34  1.000  3  3.000  1 -3.000
170
ZN(OH)4      300     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -41.199     43.700
 34  1.000  3  4.000  1 -4.000
171
ZNOHCL A     400      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -7.480      0.000
 34  1.000  3  1.000  1 -1.000 13  1.000
172
ZN(HS)2      500      0.000     -4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    82.260   -120.280
 34  1.000 29  2.000  1 18.000  2 16.000  3 -8.000
173
ZN(HS)3      500     -1.000     -6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   117.080   -180.420
 34  1.000 29  3.000  1 27.000  2 24.000  3-12.000
174
ZNSO4 AQ     200      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     2.370      1.360
 34  1.000 29  1.000
175
ZN(SO4)2     200     -2.000     12.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     3.280      0.000
 34  1.000 29  2.000
176
ZNBR +       200      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -0.580      0.000
 34  1.000  9  1.000
177
ZNBR2 AQ     200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -0.980      0.000
 34  1.000  9  2.000
178
ZNI +        200      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -2.910      0.000
 34  1.000 18  1.000
179
ZNI2 AQ      200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -1.690      0.000
 34  1.000 18  2.000
180
ZNHCO3 +     300      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     2.100      0.000
 34  1.000 10  1.000  1  1.000
181
ZNCO3 AQ     200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     5.300      0.000
 34  1.000 10  1.000
182
ZN(CO3)2     200     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     9.630      0.000
 34  1.000 10  2.000
183
CDCL +       200      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
      1.980      0.590
 12   1.000 13   1.000
184
CDCL2 AQ     200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      2.600      1.240
 12   1.000 13   2.000
185
CDCL3 -      200     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      2.399      3.900
 12   1.000 13   3.000
186
CDF +        200      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      1.100      0.000
 12   1.000 16   1.000
187
CDF2 AQ      200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      1.500      0.000
 12   1.000 16   2.000
188
CD(CO3)3     200     -4.000     12.000      0.000      0.000      0.000      6.000
      6.220      0.000
 12   1.000 10   3.000
189
CDOH +       300      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -10.080     13.100
 12   1.000  3   1.000  1 -1.000
190
CD(OH)2      300      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -20.350      0.000
 12   1.000  3   2.000  1 -2.000
191
CD(OH)3      300     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -33.300      0.000
 12   1.000  3   3.000  1 -3.000
192
CD(OH)4      300     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -47.350      0.000
 12   1.000  3   4.000  1 -4.000
193
CD2OH +3     300      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     -9.390     10.899
 12   2.000  3   1.000  1 -1.000
194
CDOHCL A     400      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     -7.404      4.355
 12   1.000  3   1.000  1 -1.000 13   1.000
195
CDNO3 +      200      1.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.399     -5.200
 12   1.000 23   1.000
196
CDSO4 AQ     200      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      2.460      1.080
 12   1.000 29   1.000
197
CDHS +       500      1.000     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     43.830    -60.140
 12   1.000 29   1.000  1  9.000  2  8.000  3 -4.000
198
CD(HS)2      500      0.000     -4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
    83.850  -120.280
 12  1.000 29  2.000  1 18.000  2 16.000  3 -8.000
199
CD(HS)3      500    -1.000    -6.000     0.000     0.000     0.000     0.000
   119.690  -180.420
 12  1.000 29  3.000  1 27.000  2 24.000  3-12.000
200
CD(HS)4      500    -2.000    -8.000     0.000     0.000     0.000     0.000
   155.540  -240.560
 12  1.000 29  4.000  1 36.000  2 32.000  3-16.000
201
CDBR +       200     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000
     2.170    -0.810
 12  1.000  9  1.000
202
CDBR2 AQ     200     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000
     2.899     0.000
 12  1.000  9  2.000
203
CDI +        200     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000
     2.150    -2.370
 12  1.000 18  1.000
204
CDI2 AQ      200     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000
     3.590     0.000
 12  1.000 18  2.000
205
CDHCO3 +     300     1.000     4.000     0.000     0.000     0.000     1.000
    12.400     0.000
 12  1.000 10  1.000  1  1.000
206
CDCO3 AQ     200     0.000     4.000     0.000     0.000     0.000     2.000
     5.399     0.000
 12  1.000 10  1.000
207
CD(SO4)2     200    -2.000    12.000     0.000     0.000     0.000     0.000
     3.500     0.000
 12  1.000 29  2.000
208
PBCL +       200     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000
     1.600     4.380
 27  1.000 13  1.000
209
PBCL2 AQ     200     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000
     1.800     1.080
 27  1.000 13  2.000
210
PBCL3 -      200    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000
     1.699     2.170
 27  1.000 13  3.000
211
PBCL4 2-     200    -2.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000
     1.380     3.530
 27  1.000 13  4.000
212
PB(CO3)2     200    -2.000     8.000     0.000     0.000     0.000     4.000
    10.640     0.000
 27  1.000 10  2.000
213
PBF +        200     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000
```

```
      1.250      0.000
 27   1.000 16   1.000
214
PBF2 AQ      200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      2.560      0.000
 27   1.000 16   2.000
215
PBF3 -       200     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      3.420      0.000
 27   1.000 16   3.000
216
PBF4 2-      200     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      3.100      0.000
 27   1.000 16   4.000
217
PBOH +       300      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     -7.710      0.000
 27   1.000  3   1.000  1 -1.000
218
PB(OH)2      300      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -17.120      0.000
 27   1.000  3   2.000  1 -2.000
219
PB(OH)3      300     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -28.060      0.000
 27   1.000  3   3.000  1 -3.000
220
PB2OH +3     300      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     -6.360      0.000
 27   2.000  3   1.000  1 -1.000
221
PBNO3 +      200      1.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      1.170      0.000
 27   1.000 23   1.000
222
PBSO4 AQ     200      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      2.750      0.000
 27   1.000 29   1.000
223
PB(HS)2      500      0.000     -4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     82.590   -120.280
 27   1.000 29   2.000  1 18.000  2 16.000  3 -8.000
224
PB(HS)3      500     -1.000     -6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    117.550   -180.420
 27   1.000 29   3.000  1 27.000  2 24.000  3-12.000
225
PB3(OH)4     300      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -23.880     26.500
 27   3.000  3   4.000  1 -4.000
226
PBBR +       200      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      1.770      2.880
 27   1.000  9   1.000
227
PBBR2 AQ     200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      1.440      0.000
 27   1.000  9   2.000
228
PBI +        200      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
     1.940      0.000
 27  1.000 18  1.000
229
PBI2 AQ      200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     3.199      0.000
 27  1.000 18  2.000
230
PBCO3 AQ     200      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      2.000
     7.240      0.000
 27  1.000 10  1.000
231
PB(OH)4      300     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -39.699      0.000
 27  1.000  3  4.000  1 -4.000
232
PB(SO4)2     200     -2.000     12.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     3.470      0.000
 27  1.000 29  2.000
233
PBHCO3 +     300      1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      1.000
    13.200      0.000
 27  1.000 10  1.000  1  1.000
234
NIBR +       200      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     0.500      0.000
 25  1.000  9  1.000
235
NICL +       200      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     0.399      0.000
 25  1.000 13  1.000
236
NIF +        200      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     1.300      0.000
 25  1.000 16  1.000
237
NIOH +       300      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -9.860     12.420
 25  1.000  3  1.000  1 -1.000
238
NI(OH)2      300      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -19.000      0.000
 25  1.000  3  2.000  1 -2.000
239
NI(OH)3      300     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -30.000      0.000
 25  1.000  3  3.000  1 -3.000
240
NISO4 AQ     200      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     2.290      1.520
 25  1.000 29  1.000
241
NICL2 AQ     200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     0.960      0.000
 25  1.000 13  2.000
242
NIHCO3 +     300      1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      1.000
    12.470      0.000
 25  1.000 10  1.000  1  1.000
243
NICO3 AQ     200      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      2.000
```

```
      6.870      0.000
 25  1.000 10  1.000
244
NI(CO3)2     200     -2.000      8.000      0.000      0.000      0.000      4.000
     10.110      0.000
 25  1.000 10  2.000
245
NI(SO4)2     200     -2.000     12.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      1.020      0.000
 25  1.000 29  2.000
246
AGBR AQ      200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      4.240      0.000
  4  1.000  9  1.000
247
AGBR2 -      200     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      7.280      0.000
  4  1.000  9  2.000
248
AGCL AQ      200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      3.270     -2.680
  4  1.000 13  1.000
249
AGCL2 -      200     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      5.270     -3.930
  4  1.000 13  2.000
250
AGCL3 2-     200     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      5.290      0.000
  4  1.000 13  3.000
251
AGCL4 -3     200     -3.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      5.510      0.000
  4  1.000 13  4.000
252
AGF AQ       200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      0.360     -2.830
  4  1.000 16  1.000
253
AGHS AQ      500      0.000     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     47.710    -60.140
  4  1.000 29  1.000  1  9.000  2  8.000  3 -4.000
254
AG(HS)2      500     -1.000     -4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     85.770   -120.280
  4  1.000 29  2.000  1 18.000  2 16.000  3 -8.000
255
AGI AQ       200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      6.600      0.000
  4  1.000 18  1.000
256
AGI2 -       200     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     10.680      0.000
  4  1.000 18  2.000
257
AGOH AQ      300      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -12.000      0.000
  4  1.000  3  1.000  1 -1.000
258
AG(OH)2      300     -1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
   -24.000      0.000
  4  1.000  3  2.000  1 -2.000
259
AGSO4 -      200     -1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      1.290      1.490
  4  1.000 29  1.000
260
AGNO3 AQ     200      0.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     -0.290      0.000
  4  1.000 23  1.000
261
AG(NO2)2     500     -1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     59.360    -87.520
  4  1.000 23  2.000  1  4.000  2  4.000  3 -2.000
262
AGBR3 2-     200     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
      8.710      0.000
  4  1.000  9  3.000
263
AGI3 2-      200     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     13.370    -27.030
  4  1.000 18  3.000
264
AGI4 -3      200     -3.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     14.080      0.000
  4  1.000 18  4.000
265
H2ASO3 -     400     -1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     10.216    -23.455
  1  1.000  6  1.000  2  2.000  3 -1.000
266
HASO3 2-     300     -2.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     -1.886    -15.816
  6  1.000  2  2.000  3 -1.000
267
ASO3 -3      400     -3.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -15.300     -9.765
  1 -1.000  6  1.000  2  2.000  3 -1.000
268
H4ASO3 +     400      1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     19.139    -30.015
  1  3.000  6  1.000  2  2.000  3 -1.000
269
H2ASO4 -     200     -1.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     -2.243     -1.690
  6  1.000  1 -1.000
270
HASO4 2-     200     -2.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     -9.001     -0.920
  6  1.000  1 -2.000
271
ASO4 -3      200     -3.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -20.597      3.430
  6  1.000  1 -3.000
272
HCO3 -       210     -1.000      4.000      0.000      5.400      0.000      1.000
     10.330     -3.617       -6.498     0.02379     2902.39
 10  1.000  1  1.000
273
H2CO3 AQ     210      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
    16.681     -2.247    -21.3415      0.05657      6307.1
 10  1.000   1  2.000
274
HSO4 -         210     -1.000      6.000      0.000      4.500      0.000      0.000
     1.987      4.910     -5.3505  0.0183412   557.2461
 29  1.000   1  1.000
275
HF AQ          200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     3.169      3.460
 16  1.000   1  1.000
276
HF2 -          200     -1.000      0.000      0.000      3.500      0.000      0.000
     3.749      4.550
 16  2.000   1  1.000
277
H2F2 AQ        200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     6.768      0.000
 16  2.000   1  2.000
278
HPO4 2-        200     -2.000      0.000      0.000      5.000      0.000      1.000
    12.346     -3.530
 26  1.000   1  1.000
279
H2PO4 -        200     -1.000      0.000      0.000      5.400      0.000      0.000
    19.553     -4.520
 26  1.000   1  2.000
280
H3PO4 AQ       200      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    21.700     -2.620
 26  1.000   1  3.000
281
H2S AQ         400      0.000     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    40.654    -65.440
  1 10.000 29  1.000   2  8.000   3 -4.000
282
S 2-           400     -2.000     -2.000      0.000      5.000      0.000      2.000
    20.742    -48.040
  1  8.000 29  1.000   2  8.000   3 -4.000
283
UOH +3         400      3.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     8.560    -22.715
  3 -1.000   1  3.000 32  1.000   2  2.000
284
U(OH)2 +       300      2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     6.946    -16.700
  1  2.000 32  1.000   2  2.000
285
U(OH)3 +       400      1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     4.281    -11.785
  3  1.000   1  1.000 32  1.000   2  2.000
286
U(OH)4 A       300      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     0.718     -9.670
  3  2.000 32  1.000   2  2.000
287
U(OH)5 -       400     -1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -3.904     -6.855
  3  3.000   1 -1.000 32  1.000   2  2.000
288
UF +3          500      3.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
    17.875    -29.380
 16  1.000 32  1.000  2  2.000  1  4.000  3 -2.000
289
UF2 2+        500      2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    23.673    -27.230
 16  2.000 32  1.000  2  2.000  1  4.000  3 -2.000
290
UF3 +1        500      1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    28.331    -27.280
 16  3.000 32  1.000  2  2.000  1  4.000  3 -2.000
291
UF4 AQ        500      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    32.856    -29.830
 16  4.000 32  1.000  2  2.000  1  4.000  3 -2.000
292
UF5 -1        500     -1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    34.454    -29.580
 16  5.000 32  1.000  2  2.000  1  4.000  3 -2.000
293
UF6 2-        500     -2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    36.934    -31.130
 16  6.000 32  1.000  2  2.000  1  4.000  3 -2.000
294
UCL +3        500      3.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    10.554    -24.497
 13  1.000 32  1.000  2  2.000  1  4.000  3 -2.000
295
USO4 2+       500      2.000     10.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    14.677    -30.730
 29  1.000 32  1.000  2  2.000  1  4.000  3 -2.000
296
U(SO4)2       500      0.000     16.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    18.965    -26.830
 29  2.000 32  1.000  2  2.000  1  4.000  3 -2.000
297
UHPO4 2+      500      2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    33.659    -26.930
 26  1.000  1  5.000 32  1.000  2  2.000  3 -2.000
298
U(HPO4)2      500      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    56.049    -32.730
 26  2.000  1  6.000 32  1.000  2  2.000  3 -2.000
299
U(HPO4)3      500     -2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    76.780    -42.230
 26  3.000  1  7.000 32  1.000  2  2.000  3 -2.000
300
U(HPO4)4      500     -4.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    97.699    -60.930
 26  4.000  1  8.000 32  1.000  2  2.000  3 -2.000
301
UO2OH +1      300      1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -5.090     10.216
 32  1.000  3  1.000  1 -1.000
302
UO2)2OH2      300      2.000     12.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -5.645     10.230
 32  2.000  3  2.000  1 -2.000
303
UO2)3OH5      300      1.000     18.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
   -15.593     25.075
 32  3.000  3  5.000  1 -5.000
304
UO2CO3 A     210      0.000     10.000      0.000      0.000      0.000      2.000
    10.071      0.840       -9.56     0.03434      2809.0
 32  1.000 10  1.000
305
UO2CO3)2     210     -2.000     14.000      0.000      0.000      0.000      4.000
    17.008      3.480       14.14      0.0096
 32  1.000 10  2.000
306
UO2CO3)3     200     -4.000     18.000      0.000      0.000      0.000      6.000
    21.384     -8.780
 32  1.000 10  3.000
307
UO2F +1      200      1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     5.105     -0.450
 32  1.000 16  1.000
308
UO2F2 AQ     200      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     8.920     -0.900
 32  1.000 16  2.000
309
UO2F3 -1     200     -1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    11.364     -0.850
 32  1.000 16  3.000
310
UO2F4 2-     200     -2.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    12.607     -1.100
 32  1.000 16  4.000
311
UO2CL +1     200      1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     0.220      1.233
 32  1.000 13  1.000
312
UO2SO4 A     210      0.000     12.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     2.709      5.100      11.384     -0.07088        0.0     1.40277E-04
 32  1.000 29  1.000
313
UO2SO4)2     210     -2.000     18.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     4.183      6.100      12.130   -0.068297        0.0      1.3987E-04
 32  1.000 29  2.000
314
UO2HPO4      300      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    20.814     -2.100
 32  1.000 26  1.000  1  1.000
315
UO2HPO4)     300     -2.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    42.988    -11.399
 32  1.000 26  2.000  1  2.000
316
UO2H2PO4     300      1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    22.643     -3.700
 32  1.000 26  1.000  1  2.000
317
UO2H2PO4     300      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    44.700    -16.500
 32  1.000 26  2.000  1  4.000
318
UO2H2PO4     300     -1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
     66.245    -28.600
  32  1.000 26  3.000  1  6.000
319
UO2H3SIO     300      1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     -2.400      0.000
  32  1.000 30  1.000  1 -1.000
320
VOH +        400      1.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     12.740    -35.330
   3 -1.000   1  3.000 33  1.000  2  3.000
321
VOH 2+       400      2.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     20.310    -34.880
   3 -1.000   1  3.000 33  1.000  2  2.000
322
V(OH)2 +     300      1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     16.780    -44.230
   1  2.000 33  1.000  2  2.000
323
V(OH)3 A     400      0.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     11.590    -44.230
   3  1.000   1  1.000 33  1.000  2  2.000
324
VSO4 +1      500      1.000      9.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     24.050    -44.230
  29  1.000 33  1.000  2  2.000  1  4.000  3 -2.000
325
V2(OH)3      400      3.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     37.720    -88.460
   3 -1.000   1  5.000 33  2.000  2  4.000
326
V2(OH)2      400      4.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     41.470    -88.460
   3 -2.000   1  6.000 33  2.000  2  4.000
327
V(OH)3 +     400      1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     11.260    -29.320
   3  1.000   1  1.000 33  1.000  2  1.000
328
H2V2O4 +     300      2.000      8.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     27.420    -58.640
   1  2.000 33  2.000  2  2.000
329
VOF +        500      1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     20.270    -27.420
  16  1.000 33  1.000  2  1.000  1  2.000  3 -1.000
330
VOF2 AQ      500      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     22.670    -25.820
  16  2.000 33  1.000  2  1.000  1  2.000  3 -1.000
331
VOF3 -1      500     -1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     24.230    -24.420
  16  3.000 33  1.000  2  1.000  1  2.000  3 -1.000
332
VOF4 2-      500     -2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     25.040    -22.920
  16  4.000 33  1.000  2  1.000  1  2.000  3 -1.000
333
VOSO4 AQ     500      0.000     10.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
    19.380   -25.600
 29  1.000 33  1.000  2  1.000  1  2.000  3 -1.000
334
VOCL +1      500      1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    16.950   -29.320
 13  1.000 33  1.000  2  1.000  1  2.000  3 -1.000
335
H3VO4 AQ     300      0.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -3.300    10.630
 33  1.000  3  2.000  1 -1.000
336
H2VO4 -1     300     -1.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -7.090    11.330
 33  1.000  3  2.000  1 -2.000
337
HVO4 2-      300     -2.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -15.150    14.930
 33  1.000  3  2.000  1 -3.000
338
VO4 -3       300     -3.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -28.400    19.530
 33  1.000  3  2.000  1 -4.000
339
V2O7 -4      300     -4.000     10.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -29.080     0.000
 33  2.000  3  3.000  1 -6.000
340
HV2O7 -3     300     -3.000     10.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -16.320     0.000
 33  2.000  3  3.000  1 -5.000
341
H3V2O7 -     300     -1.000     10.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -3.790     0.000
 33  2.000  3  3.000  1 -3.000
342
V3O9 -3      300     -3.000     15.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -15.880     0.000
 33  3.000  3  3.000  1 -6.000
343
V4O12 -4     300     -4.000     20.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -20.790     0.000
 33  4.000  3  4.000  1 -8.000
344
V10O28 -     300     -6.000     50.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -17.530     0.000
 33 10.000  3  8.000  1-16.000
345
HV10O28      300     -5.000     50.000      0.000      0.000      0.000      0.000
   -11.350    21.520
 33 10.000  3  8.000  1-15.000
346
H2V10O28     300     -4.000     50.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -7.710     0.000
 33 10.000  3  8.000  1-14.000
347
VO2F AQ      200      0.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     3.120     0.000
 33  1.000 16  1.000
348
VO2F2 -1     200     -1.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
```

```
     5.670      0.000
 33  1.000 16  2.000
349
VO2F3 2-     200     -2.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     6.970      0.000
 33  1.000 16  3.000
350
VO2F4 -3     200     -3.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     7.070      0.000
 33  1.000 16  4.000
351
VO2SO4 -     200     -1.000     11.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     1.710      0.000
 33  1.000 29  1.000
352
VO2NO3 A     200      0.000     10.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -0.430      0.000
 33  1.000 23  1.000
353
HSO3-        400     -1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     3.570     -1.620
  1  3.000 29  1.000  2  2.000  3 -1.000
354
H2SO3 AQ     400      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     5.340      3.990
  1  4.000 29  1.000  2  2.000  3 -1.000
355
CUSO3-       500     -1.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     6.880     -1.250
 29  1.000  1  2.000  2  3.000  3 -1.000 15  1.000
356
CU(SO3)2     500     -3.000      9.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     4.030     -4.150
 15  1.000  2  5.000 29  2.000  1  4.000  3 -2.000
357
CU(SO3)3     500     -5.000     13.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     1.120     -7.050
 15  1.000  2  7.000 29  3.000  1  6.000  3 -3.000
358
AGSO3-       500     -1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     1.950     -2.900
  4  1.000 29  1.000  1  2.000  2  2.000  3 -1.000
359
AGSO3)2-     500     -3.000      8.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     1.380     -5.800
  4  1.000 29  2.000  1  4.000  2  4.000  3 -2.000
360
AGSO3)3-     500     -5.000     12.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    -1.950     -8.700
  4  1.000 29  3.000  1  6.000  2  6.000  3 -3.000
361
AG2SO3)      500      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.000
     4.960     -2.900
  4  2.000 29  1.000  1  2.000  2  2.000  3 -1.000
362
O2 AQ        300       .000      4.000       .000       .000       .000       .000
   -86.080    134.790  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
  3  2.000  1 -4.000  2 -4.000
363
H2SEO3       200       .000      4.000       .000       .000       .000       .000
```

```
    10.940       .410  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 37  1.000  1  1.000
364
SEO4 2-      400    -2.000      6.000      5.600       .000       .000       .000
   -27.960     46.820  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
  1 -3.000  2 -2.000  3  1.000 37  1.000
365
HSEO4-       400    -1.000      6.000      2.900       .000       .000       .000
   -26.300     52.320  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
  1 -2.000  2 -2.000 37  1.000  3  1.000
366
H2SEO4       400      .000      6.000       .000       .000       .000       .000
   -25.610       .000  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 37  1.000  3  1.000  1  -1.000 2  -2.000
367
SE2-2        400    -2.000     -1.000      5.500       .000       .000       .000
   101.830       .000  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
  3 -3.000  1  4.000 37  2.000  2  4.000
369
HSE-         400    -1.000     -2.000      2.900       .000       .000       .000
    53.230    -79.450  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
  3 -3.000 37  1.000  1  6.000  2  6.000
370
H2SE         400      .000     -2.000       .000       .000       .000       .000
    57.040    -78.650  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
  3 -3.000 37  1.000  1  7.000  2  6.000
368
SE-2         400    -2.000     -2.000      5.700       .000       .000       .000
    38.270    -67.950  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
  3 -3.000 37  1.000  1  5.000  2  6.000
371
SEO3-2       200    -2.000      4.000      5.600       .000       .000       .000
     8.500     -1.180  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 37  1.000  1 -1.000
381
THOH+3       300     3.000      0.0        0.0        0.0        0.0        1.0
    -2.34      +5.915  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.000  3  1.000  1 -1.000
382
TH(OH)2+2    300     2.000      0.0        0.0        0.0        0.0        2.0
    -6.36     +13.93   .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    3  2.0    1 -2.0
383
TH(OH)3+     300     1.0        0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
   -11.70     +20.35   .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    3  3.0    1 -3.0
384
TH(OH)4      300     0.0        0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
   -15.900    +18.66   .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    3  4.0    1 -4.0
385
THH2PO4+3    300     3.0        0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
    24.07       0.0    .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0   26  1.0    1  2.0
386
THH2PO42+    300     2.0        0.0        0.0        0.0        0.0        0.0
    47.98       0.0    .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0   26  2.0    1  4.0
387
THSO4+2      200     2.0        6.0        0.0        0.0        0.0        0.0
```

```
     5.45        4.000  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    29  1.0
388
TH(SO4)2      200       0.0        12.0         0.0
     9.73        7.6     .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    29  2.0
389
THCL4         200       0.0         0.0         0.0         0.0         0.0         0.0
     0.94        0.0     .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    13  4.0
390
THF4          200       0.0         0.0         0.0         0.0         0.0         0.0
    23.17       -3.700   .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    16  4.0
416
TH2OH2+6      300       6.0         0.0         0.0                                 2.0
    -5.41                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  2.0     3  2.0     1 -2.0
417
TH4OH8+8      300       8.0         0.0         0.0                                 8.0
   -20.08                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  4.0     3  8.0     1 -8.0
418
TH6OH15+      300       9.0         0.0         0.0                                15.0
   -43.84                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  6.0     3 15.0     1-15.0
419
TH2OH3+5      300       5.0         0.0         0.0                                 3.0
    -8.44                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  2.0     3  3.0     1 -3.0
420
TH6OH14+      300      10.0         0.0         0.0                                14.0
   -38.83                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  6.0     3 14.0     1-14.0
421
THCO3+2       200       2.0         4.0         0.0                                 2.0
    11.03                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    10  1.0
422
THF+3         200       3.0         0.0         0.0                                 0.0
     8.44                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    16  1.0
423
THF2+2        200       2.0         0.0         0.0                                 0.0
    15.06                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    16  2.0
424
THF3+1        200       1.0         0.0         0.0                                 0.0
    19.81                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    16  3.0
425
THCL+3        200       3.0         0.0         0.0                                 0.0
     1.18                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    13  1.0
426
THCL2+2       200       2.0         0.0         0.0                                 0.0
     0.92                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0    13  2.0
427
THCL3+1       200       1.0         0.0         0.0                                 0.0
```

```
     1.71                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0   13  3.0
428
THSO43-2     200     -2.0       18.0        0.0                                0.0
    10.50                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0   29  3.0
429
THSO44-4     200     -4.0       24.0        0.0                                0.0
     8.48                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0   29  4.0
430
THHPO4+2     300      2.0        0.0        0.0                                1.0
    25.25                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0   26  1.0    1  1.0
431
THHPO42      300      0.0        0.0        0.0                                2.0
    47.49                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0   26  2.0    1  2.0
432
THHPO43      300     -2.0        0.0        0.0                                3.0
    68.3                 .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0   26  3.0    1  3.0
433
THH3PO4      300      4.0        0.0        0.0                                0.0
    23.60                .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00  .00000E+00
 38  1.0   26  1.0    1  3.0

LOOK MIN
URANINIT     2          4.00     -13.92      15.80      0                0.000      URANI
  32       1.000    2        2.000
UO2  (AM     2          4.00      -8.28       8.20      0                0.000      UO2
  32       1.000    2        2.000
U4O9 (C)     4         18.00     -40.25      36.49      0                0.000      U4O9
   1      -2.000    2        6.000    3       1.000   32        4.000
U3O8 (C)     4         16.00      -6.54     -12.73      0                0.000      U3O8
   1      -4.000    2        2.000    3       2.000   32        3.000
USIO4 (C     4          4.00     -16.84      19.88      0                0.000      USIO4
  30       1.000   32        1.000    2       2.000    3       -2.000
UF4  (C)     5          4.00     -27.82      15.53      0                0.000      UF4
  16       4.000   32        1.000    2       2.000    1        4.000    3      -2.000
UF4.2.5H     5          4.00     -36.79      33.84      0                0.000      UF4.2
  16       4.000    3        0.500   32       1.000    2        2.000    1       4.000
UHPO4)2,     5          4.00     -60.80      38.27      0                0.000      UHPO4
  26       2.000    1        6.000    3       2.000   32        1.000    2       2.000
NINGYOIT     5          4.00     -63.12      32.16      0                0.000      NINGY
  11       1.000   26        2.000   32       1.000    2        2.000    1       4.000
UO3 (C)      3          6.00       7.72     -19.32      0                0.000      UO3 (
   1      -2.000   32        1.000    3       1.000
GUMMITE      3          6.00      10.40     -23.01      0                0.000      GUMMI
   1      -2.000   32        1.000    3       1.000
B-UO2(OH     3          6.00       5.54     -13.73      0                0.000      B-UO2
   1      -2.000   32        1.000    3       2.000
SCHOEPIT     3          6.00       5.40     -12.05      0                0.000      SCHOE
   1      -2.000   32        1.000    3       3.000
RUTHERFO     2         10.00     -14.44      -1.44      1                0.000      RUTHE
  32       1.000   10        1.000
   4.54          -0.03318     -2716.0
(UO2)3(P     2         18.00     -49.04      94.90      0                0.000      (UO2)
  32       3.000   26        2.000
H-AUTUNI     3         12.00     -47.93      -3.60      0                0.000      H-AUT
```

```
   1       2.000   32        2.000   26       2.000
NA-AUTUN    3          12.00     -47.41      -0.46      0                0.000      NA-AU
  24        2.000   32        2.000   26       2.000
K-AUTUNI    3          12.00     -48.24       5.86      0                0.000      K-AUT
  19        2.000   32        2.000   26       2.000
URAMPHIT    6           6.00    -289.90     383.81      0                0.000      URAMP
  32        2.000   26        2.000   23       2.000    3      -6.000    1      20.000
   2       16.000
SALEEITE    3          12.00     -43.65     -20.18      0                0.000      SALEE
  32        2.000   21        1.000   26       2.000
AUTUNITE    3          12.00     -43.93     -14.34      0                0.000      AUTUN
  32        2.000   11        1.000   26       2.000
SR-AUTUN    3          12.00     -44.46     -13.05      0                0.000      SR-AU
  32        2.000   31        1.000   26       2.000
URANOCIR    3          12.00     -44.63     -10.10      0                0.000      URANO
  32        2.000    8        1.000   26       2.000
BASSETIT    3          14.00     -44.49     -19.90      0                0.000      BASSE
  32        2.000   17        1.000   26       2.000
TORBERNI    3          14.00     -45.28     -15.90      0                0.000      TORBE
  32        2.000   15        1.000   26       2.000
PRZHEVAL    3          12.00     -44.37     -11.00      0                0.000      PRZHE
  32        2.000   27        1.000   26       2.000
URANOPHA    4          12.00      17.49       0.00      0                0.000      URANO
   1       -6.000   32        2.000   11       1.000   30       2.000
ALOH3(A)    3           0.00      10.38     -27.05      0                0.000      ALOH3
   5        1.000    3        3.000    1      -3.000
ALOHSO4     4           6.00      -3.23       0.00      0                0.000      ALOHS
   1       -1.000    5        1.000   29       1.000    3       1.000
AL4(OH)1    4           6.00      22.70       0.00      0                0.000      AL4(O
   1      -10.000    5        4.000   29       1.000    3      10.000
ALUM K      4          12.00      -5.17       7.22      0                0.000      ALUM
  19        1.000    5        1.000   29       2.000    3      12.000
ALUNITE     5          12.00      -1.35       3.92      0                0.000      ALUNI
  19        1.000    5        3.000   29       2.000    3       6.000    1      -6.000
ANHYDRIT    2           6.00      -4.64      -3.77      0                0.000      ANHYD
  11        1.000   29        1.000
ARAGONIT    2           4.00      -8.36      -2.62      1                0.000      ARAGO
  11        1.000   10        1.000
  -10.21          0.0217          0.0          -5.17E-05
ARTINITE    4           4.00       9.60     -28.74      0                0.000      ARTIN
   1       -2.000   21        2.000   10       1.000    3       5.000
BAF2        2           0.00      -5.76       1.00      0                0.000      BAF2
   8        1.000   16        2.000
BARITE      2           6.00      -9.98       6.28      0                0.000      BARIT
   8        1.000   29        1.000
BOEHMITE    3           0.00       8.58     -28.13      0                0.000      BOEHM
   1       -3.000    5        1.000    3       2.000
BRUCITE     3           0.00      16.79     -25.84      0                0.000      BRUCI
  21        1.000    3        2.000    1      -2.000
CALCITE     2           4.00      -8.48      -2.59      1                0.000      CALCI
  11        1.000   10        1.000
  13.543         -0.0401         -3000.0
CELESTIT    2           6.00      -6.47      -0.47      0                0.000      CELES
  31        1.000   29        1.000
CHALCEDO    2           0.00      -3.52       4.61      0                0.000      CHALC
   3       -2.000   30        1.000
CHRYSOTI    4           0.00      32.19     -52.49      0                0.000      CHRYS
   1       -6.000   21        3.000   30       2.000    3       1.000
CLINOENS    4           0.00      11.34     -20.01      0                0.000      CLINO
   3       -1.000   21        1.000   30       1.000    1      -2.000
```

```
CRISTOBA   2          0.00      -3.59       5.50      0                0.000      CRIST
   3     -2.000  30       1.000
DIASPORE   3          0.00       6.87     -24.63      0                0.000      DIASP
   1     -3.000   5       1.000   3         2.000
DIOPSIDE   5          0.00      19.89     -32.28      0                0.000      DIOPS
   3     -2.000  11       1.000  21         1.000  30      2.000   1      -4.000
DOLOMITE   3          8.00     -17.00      -8.29      0                0.000      DOLOM
  11      1.000  21       1.000  10         2.000
EPSOMITE   3          6.00      -2.14       2.82      0                0.000      EPSOM
  21      1.000  29       1.000   3         7.000
SEPIOLIT   4          0.00      15.91     -27.27      0                0.000      SEPIO
   3     -0.500  21       2.000  30         3.000   1      -4.000
FERRIHYD   4          3.00      17.92     -10.00      0                0.000      FERRI
   1     -3.000   3       3.000  17         1.000   2      -1.000
FE3(OH)8   4          8.00      46.29     -20.00      0                0.000      FE3(O
   1     -8.000  17       3.000   3         8.000   2      -2.000
FEOH)2.7   5          3.00       9.99     -10.00      0                0.000      FEOH)
   1     -2.700   3       2.700  13         0.300  17       1.000   2      -1.000
FES PPT    5          0.00     -37.58      60.14      0                0.000      FES P
   1      8.000  17       1.000  29         1.000   2       8.000   3      -4.000
FE2(SO4)   3         24.00      29.64     -79.12      0                0.000      FE2(S
  29      3.000  17       2.000   2        -2.000
FCO3APAT   5          4.80    -114.40      39.39      0                0.000      FCO3A
  11      9.496  21       0.144  26         4.800  10       1.200  16       2.480
FLUORITE   2          0.00     -10.96       4.71      0                0.000      FLUOR
  11      1.000  16       2.000
FORSTERI   3          0.00      28.30     -48.51      0                0.000      FORST
   1     -4.000  21       2.000  30         1.000
GIBBSITE   3          0.00       8.77     -22.80      0                0.000      GIBBS
   1     -3.000   5       1.000   3         3.000
GOETHITE   4          3.00      13.53     -24.48      0                0.000      GOETH
   1     -3.000   3       2.000  17         1.000   2      -1.000
GREENALI   4          6.00      20.81       0.00      0                0.000      GREEN
   1     -6.000  17       3.000  30         2.000   3       1.000
GREIGITE   5          0.00    -153.61     220.56      0                0.000      GREIG
   1     32.000  17       3.000   2        30.000  29       4.000   3     -16.000
GYPSUM     3          6.00      -4.85       0.26      0                0.000      GYPSU
  11      1.000  29       1.000   3         2.000
HALITE     2          0.00       1.58       0.92      0                0.000      HALIT
  24      1.000  13       1.000
HEMATITE   4          6.00      22.06     -50.85      0                0.000      HEMAT
   1     -6.000   3       3.000  17         2.000   2      -2.000
HUNTITE    3         16.00     -29.97     -25.76      0                0.000      HUNTI
  21      3.000  11       1.000  10         4.000
HYDRMAGN   4         16.00      -8.77     -52.21      0                0.000      HYDRM
  21      5.000  10       4.000   1        -2.000   3       6.000
JAROSITE   6         21.00      27.90     -66.18      0                0.000      JAROS
   1     -6.000  24       1.000  29         2.000   3       6.000  17       3.000
   2     -3.000
JAROSITE   6         21.00      24.30     -61.28      0                0.000      JAROS
   1     -6.000  19       1.000  29         2.000   3       6.000  17       3.000
   2     -3.000
JAROSITE   5         21.00      27.00     -85.15      0                0.000      JAROS
   1     -5.000  29       2.000   3         7.000  17       3.000   2      -3.000
MACKINAW   5          0.00     -38.31      60.14      0                0.000      MACKI
   1      8.000  17       1.000  29         1.000   2       8.000   3      -4.000
MAGADIIT   4          0.00     -14.30       0.00      0                0.000      MAGAD
   1     -1.000   3      -9.000  24         1.000  30       7.000
MAGHEMIT   4          6.00      32.45     -20.00      0                0.000      MAGHE
   1     -6.000   3       3.000  17         2.000   2      -2.000
```

```
MAGNESIT   2          4.00      -8.03      -6.17      0                0.000      MAGNE
  21       1.000  10       1.000
MAGNETIT   4          8.00      29.80     -70.46      0                0.000      MAGNE
   1      -8.000  17       3.000   3       4.000   2       -2.000
MELANTER   3          8.00      -2.47       2.86      0                0.000      MELAN
  17       1.000  29       1.000   3       7.000
MIRABILI   3          6.00      -1.11      18.99      0                0.000      MIRAB
  24       2.000  29       1.000   3      10.000
NATRON     3          4.00      -1.31      15.74      0                0.000      NATRO
  24       2.000  10       1.000   3      10.000
NESQUEHO   3          4.00      -5.62      -5.79      0                0.000      NESQU
  21       1.000  10       1.000   3       3.000
PHLOGOPI   5          0.00      66.30     -86.36      0                0.000      PHLOG
   1     -10.000  19       1.000  21       3.000   5       1.000  30       3.000
PYRITE     5          0.00     -85.80     131.58      0                0.000      PYRIT
   1      16.000   2      14.000  17       1.000  29       2.000   3      -8.000
QUARTZ     2          0.00      -4.01       6.22      0                0.000      QUART
   3      -2.000  30       1.000
SEPIOLIT   4          0.00      18.78       0.00      0                0.000      SEPIO
   3      -0.500  21       2.000  30       3.000   1       -4.000
SIDERITE   2          6.00     -10.55      -5.33      0                0.000      SIDER
  17       1.000  10       1.000
SIO2(A,G   2          0.00      -3.02       4.44      1                0.000      SIO2(
   3      -2.000  30       1.000
  0.3380      -0.0007889    -840.1
SIO2(A,P   2          0.00      -2.71       3.91      1                0.000      SIO2(
   3      -2.000  30       1.000
0.3380         -0.0007889    -840.1
SRF2       2          0.00      -8.54       1.25      0                0.000      SRF2
  31       1.000  16       2.000
STRENGIT   4          3.00     -13.37     -12.03      0                0.000      STREN
  26       1.000   3       2.000  17       1.000   2       -1.000
STRONTIA   2          4.00      -9.25      -0.69      0                0.000      STRON
  31       1.000  10       1.000
TALC       4          0.00      23.06     -35.01      0                0.000      TALC
   3      -4.000  21       3.000  30       4.000   1       -6.000
THENARDI   2          6.00      -0.18      -0.57      0                0.000      THENA
  24       2.000  29       1.000
THERMONA   3          4.00       0.13      -2.80      0                0.000      THERM
  24       2.000  10       1.000   3       1.000
TREMOLIT   5          0.00      56.55     -96.61      0                0.000      TREMO
   3      -8.000  11       2.000  21       5.000  30       8.000   1      -14.000
VIVIANIT   3          6.00     -36.00       0.00      0                0.000      VIVIA
  17       3.000  26       2.000   3       8.000
WITHERIT   2          4.00      -8.59       0.36      0                0.000      WITHE
   8       1.000  10       1.000
PYROLUSI   4          4.00      41.37     -54.94      0                0.000      PYROL
   1      -4.000   2      -2.000   3       2.000  22       1.000
BIRNESSI   4          4.00      43.60     -25.76      0                0.000      BIRNE
   1      -4.000   2      -2.000   3       2.000  22       1.000
NSUTITE    4          4.00      43.01     -25.76      0                0.000      NSUTI
   1      -4.000   2      -2.000   3       2.000  22       1.000
BIXBYITE   4          6.00      50.40     -66.76      0                0.000      BIXBY
   1      -6.000   3       3.000  22       2.000   2       -2.000
HAUSMANN   4          8.00      61.54     -80.14      0                0.000      HAUSM
   1      -8.000   2      -2.000  22       3.000   3       4.000
PYROCROI   3          2.00      15.09     -22.59      0                0.000      PYROC
   1      -2.000  22       1.000   3       2.000
MANGANIT   4          3.00      25.27     -25.76      0                0.000      MANGA
   1      -3.000   3       2.000  22       1.000   2       -1.000
```

```
RHODOCHR    2          6.00    -10.41     -2.08     0              0.000     RHODO
  22      1.000  10      1.000
MNCL2, 4    3          2.00      2.71     17.38     0              0.000     MNCL2
  22      1.000  13      2.000   3          4.000
MNS GREE    5          0.00    -29.86     54.35     0              0.000     MNS G
   1      8.000  22      1.000  29          1.000   2      8.000   3     -4.000
MNSO4       2          8.00      2.67    -15.48     0              0.000     MNSO4
  22      1.000  29      1.000
MN2(SO4)    3         24.00     45.30     -90.58     0              0.000     MN2(S
  29      3.000  22      2.000   2         -2.000
MN3(PO4)    2          6.00    -23.83      2.12     0              0.000     MN3(P
  22      3.000  26      2.000
CU METAL    2          0.00    -11.48     15.48     0              0.000     CU ME
   2      2.000  15      1.000
NANTOKIT    3          1.00     -9.48      8.33     0              0.000     NANTO
  13      1.000  15      1.000   2          1.000
CUF         3          1.00      4.36    -14.02     0              0.000     CUF
  16      1.000  15      1.000   2          1.000
CUPRITE     4          2.00     -6.99      2.94     0              0.000     CUPRI
   1     -2.000   3      1.000  15          2.000   2      2.000
CHALCOCI    5          0.00    -73.72    106.19     0              0.000     CHALC
   1      8.000  15      2.000   2         10.000  29      1.000   3     -4.000
DJURLEIT    5          0.00    -72.66    104.94     0              0.000     DJURL
   1      8.000  15      1.934   2          9.868  29      1.000   3     -4.000
ANILITE     5          0.00    -69.62    101.20     0              0.000     ANILI
   1      8.000  15      1.750   2          9.500  29      1.000   3     -4.000
BLAUBLEI    5          0.00    -63.12     58.82     0              0.000     BLAUB
   1      8.000  15      1.400   2          8.800  29      1.000   3     -4.000
BLAUBLEI    5          0.00    -58.37     59.81     0              0.000     BLAUB
   1      8.000  15      1.100   2          8.200  29      1.000   3     -4.000
COVELLIT    5          0.00    -56.70     84.15     0              0.000     COVEL
   1      8.000  15      1.000  29          1.000   2      8.000   3     -4.000
CU2SO4      3          8.00     -7.39     -7.86     0              0.000     CU2SO
  29      1.000  15      2.000   2          2.000
CUPROUSF    4          4.00      1.39    -15.45     0              0.000     CUPRO
   1     -4.000   3      2.000  15          1.000  17      1.000
MELANOTH    2          2.00      3.73    -12.32     0              0.000     MELAN
  15      1.000  13      2.000
CUCO3       2          6.00     -9.63      0.00     0              0.000     CUCO3
  15      1.000  10      1.000
CUF2        2          2.00     -0.62    -13.32     0              0.000     CUF2
  15      1.000  16      2.000
CUF2, 2H    3          2.00     -4.55     -3.65     0              0.000     CUF2,
  15      1.000  16      2.000   3          2.000
CU(OH)2     3          2.00      8.64    -15.25     0              0.000     CU(OH
   1     -2.000  15      1.000   3          2.000
ATACAMIT    4          4.00      7.34    -18.69     0              0.000     ATACA
   1     -3.000  15      2.000   3          3.000  13      1.000
CU2(OH)3    4          9.00      9.24    -17.35     0              0.000     CU2(O
   1     -3.000  15      2.000   3          3.000  23      1.000
ANTLERIT    4         12.00      8.29      0.00     0              0.000     ANTLE
   1     -4.000  15      3.000   3          4.000  29      1.000
BROCHANT    4         14.00     15.34      0.00     0              0.000     BROCH
   1     -6.000  15      4.000   3          6.000  29      1.000
LANGITE     4         14.00     16.79    -39.61     0              0.000     LANGI
   1     -6.000  15      4.000   3          7.000  29      1.000
TENORITE    3          2.00      7.62    -15.24     0              0.000     TENOR
   1     -2.000  15      1.000   3          1.000
CUOCUSO4    4         10.00     11.53    -35.58     0              0.000     CUOCU
   1     -2.000  15      2.000   3          1.000  29      1.000
```

```
CU3(PO4)    2          6.00    -36.85      0.00      0              0.000     CU3(P
  15      3.000  26       2.000
CU3(PO4)    3          6.00    -35.12      0.00      0              0.000     CU3(P
  15      3.000  26       2.000   3          3.000
CUSO4       2          8.00      3.01    -18.14      0              0.000     CUSO4
  15      1.000  29       1.000
CHALCANT    3          8.00     -2.64      1.44      0              0.000     CHALC
  15      1.000  29       1.000   3          5.000
DIOPTASE    3          2.00      6.50     -8.96      0              0.000     DIOPT
   1     -2.000  15       1.000  30          1.000
CUPRICFE    5          8.00     31.94    -58.69      0              0.000     CUPRI
   1     -8.000  15       1.000   3          4.000  17      2.000   2     -2.000
CHALCOPY    6          0.00   -102.59    155.76      0              0.000     CHALC
   1     16.000  15       1.000  17          1.000  29      2.000   2     16.000
   3     -8.000
CUBR        3          1.00    -10.93      11.43      0              0.000     CUBR
   9      1.000  15       1.000   2          1.000
CUI         3          1.00    -14.61      18.49      0              0.000     CUI
  18      1.000  15       1.000   2          1.000
ZN METAL    2         -2.00     25.76     -36.78      0              0.000     ZN ME
  34      1.000   2       2.000
ZNCL2       2          0.00      7.03     -17.48      0              0.000     ZNCL2
  34      1.000  13       2.000
SMITHSON    2          4.00    -10.00      -4.36      0              0.000     SMITH
  34      1.000  10       1.000
ZNCO3, 1    3          4.00    -10.26       0.00      0              0.000     ZNCO3
  34      1.000  10       1.000   3          1.000
ZNF2        2          0.00     -1.52     -13.08      0              0.000     ZNF2
  34      1.000  16       2.000
ZN(OH)2     3          0.00     12.45       0.00      0              0.000     ZN(OH
   1     -2.000  34       1.000   3          2.000
ZN(OH)2     3          0.00     12.20       0.00      0              0.000     ZN(OH
   1     -2.000  34       1.000   3          2.000
ZN(OH)2     3          0.00     11.75       0.00      0              0.000     ZN(OH
   1     -2.000  34       1.000   3          2.000
ZN(OH)2     3          0.00     11.71       0.00      0              0.000     ZN(OH
   1     -2.000  34       1.000   3          2.000
ZN(OH)2     3          0.00     11.50       0.00      0              0.000     ZN(OH
   1     -2.000  34       1.000   3          2.000
ZN2(OH)3    4          0.00     15.20       0.00      0              0.000     ZN2(O
   1     -3.000  34       2.000   3          3.000  13      1.000
ZN5(OH)8    4          0.00     38.50       0.00      0              0.000     ZN5(O
   1     -8.000  34       5.000   3          8.000  13      2.000
ZN2(OH)2    4          6.00      7.50       0.00      0              0.000     ZN2(O
   1     -2.000  34       2.000   3          2.000  29      1.000
ZN4(OH)6    4          6.00     28.40       0.00      0              0.000     ZN4(O
   1     -6.000  34       4.000   3          6.000  29      1.000
ZNNO3)2,    3         10.00      3.44       5.51      0              0.000     ZNNO3
  34      1.000  23       2.000   3          6.000
ZNO(ACTI    3          0.00     11.31       0.00      0              0.000     ZNO(A
   1     -2.000  34       1.000   3          1.000
ZINCITE     3          0.00     11.14     -21.86      0              0.000     ZINCI
   1     -2.000  34       1.000   3          1.000
ZN3O(SO4    4         12.00     19.02     -62.00      0              0.000     ZN3O(
   1     -2.000  34       3.000  29          2.000   3      1.000
ZN3(PO4)    3          0.00    -32.04       0.00      0              0.000     ZN3(P
  34      3.000  26       2.000   3          4.000
ZNS (A)     5         -2.00    -42.71      63.81      0              0.000     ZNS (
   1      8.000  34       1.000  29          1.000   2      8.000   3     -4.000
SPHALERI    5         -2.00    -45.28      68.39      0              0.000     SPHAL
```

```
   1      8.000   34       1.000  29       1.000    2       8.000    3      -4.000
WURTZITE   5          -2.00     -43.34      65.20      0                  0.000      WURTZ
   1      8.000   34       1.000  29       1.000    2       8.000    3      -4.000
ZNSIO3     4           0.00       2.93     -18.27      0                  0.000      ZNSIC
   1     -2.000    3      -1.000  34       1.000   30       1.000
WILLEMIT   3           0.00      15.33     -33.37      0                  0.000      WILLE
   1     -4.000   34       2.000  30       1.000
ZINCOSIT   2           6.00       3.01     -19.20      0                  0.000      ZINCC
  34      1.000   29       1.000
ZNSO4, 1   3           6.00      -0.57     -10.64      0                  0.000      ZNSO4
  34      1.000   29       1.000    3       1.000
BIANCHIT   3           6.00      -1.76      -0.16      0                  0.000      BIANC
  34      1.000   29       1.000    3       6.000
GOSLARIT   3           6.00      -1.96       3.30      0                  0.000      GOSLA
  34      1.000   29       1.000    3       7.000
ZNBR2, 2   3           0.00       5.21      -7.51      0                  0.000      ZNBR2
  34      1.000    9       2.000    3       2.000
ZNI2       2           0.00       7.23     -13.44      0                  0.000      ZNI2
  34      1.000   18       2.000
CD METAL   2          -2.00      13.49     -18.00      0                  0.000      CD ME
  12      1.000    2       2.000
GAMMA CD   2          -2.00      13.59     -18.14      0                  0.000      GAMMA
  12      1.000    2       2.000
OTAVITE    2           4.00     -13.74      -0.58      0                  0.000      OTAVI
  12      1.000   10       1.000
CDCL2      2           0.00      -0.68      -4.47      0                  0.000      CDCL2
  12      1.000   13       2.000
CDCL2, 1   3           0.00      -1.71      -1.82      0                  0.000      CDCL2
  12      1.000   13       2.000    3       1.000
CDCL2,2.   3           0.00      -1.94       1.71      0                  0.000      CDCL2
  12      1.000   13       2.000    3       2.500
CDF2       2           0.00      -2.98      -9.72      0                  0.000      CDF2
  12      1.000   16       2.000
CD(OH)2    3           0.00      13.73     -20.77      0                  0.000      CD(OH
   1     -2.000   12       1.000    3       2.000
CD(OH)2    3           0.00      13.65       0.00      0                  0.000      CD(OH
   1     -2.000   12       1.000    3       2.000
CDOHCL     4           0.00       3.52      -7.41      0                  0.000      CDOHC
   1     -1.000   12       1.000    3       1.000   13       1.000
CD3(OH)4   4           6.00      22.56       0.00      0                  0.000      CD3(O
   1     -4.000   12       3.000    3       4.000   29       1.000
CD3OH2(S   4          12.00       6.71       0.00      0                  0.000      CD3OH
   1     -2.000   12       3.000    3       2.000   29       2.000
CD4(OH)6   4           6.00      28.40       0.00      0                  0.000      CD4(O
   1     -6.000   12       4.000    3       6.000   29       1.000
MONTEPON   3           0.00      15.12     -24.76      0                  0.000      MONTE
   1     -2.000   12       1.000    3       1.000
CD3(PO4)   2           0.00     -32.60       0.00      0                  0.000      CD3(P
  12      3.000   26       2.000
CDSIO3     4           0.00       9.06     -16.63      0                  0.000      CDSIO
   3     -1.000   12       1.000   30       1.000    1      -2.000
CDSO4      2           6.00      -0.10     -14.74      0                  0.000      CDSO4
  12      1.000   29       1.000
CDSO4, 1   3           6.00      -1.66      -7.52      0                  0.000      CDSO4
  12      1.000   29       1.000    3       1.000
CDSO4,2.   3           6.00      -1.87      -4.30      0                  0.000      CDSO4
  12      1.000   29       1.000    3       2.670
GREENOCK   5          -2.00     -49.59      76.50      0                  0.000      GREEN
   1      8.000   12       1.000  29       1.000    2       8.000    3      -4.000
CDBR2, 4   3           0.00      -2.42       7.23      0                  0.000      CDBR2
```

```
  12      1.000   9       2.000   3       4.000
CDI2        2          0.00      -3.61      4.08      0                0.000      CDI2
  12      1.000  18       2.000
PB METAL    2         -2.00       4.27      0.40      0                0.000      PB MI
  27      1.000   2       2.000
COTUNNIT    2          0.00      -4.77      5.60      0                0.000      COTUN
  27      1.000  13       2.000
MATLOCKI    3          0.00      -9.43      7.95      0                0.000      MATLC
  27      1.000  13       1.000  16       1.000
PHOSGENI    3          4.00     -19.81      0.00      0                0.000      PHOSC
  27      2.000  13       2.000  10       1.000
CERRUSIT    2          4.00     -13.13      4.86      0                0.000      CERRU
  27      1.000  10       1.000
PBF2        2          0.00      -7.44     -0.70      0                0.000      PBF2
  27      1.000  16       2.000
MASSICOT    3          0.00      12.91    -16.78      0                0.000      MASSI
   1     -2.000  27       1.000   3       1.000
LITHARGE    3          0.00      12.72    -16.38      0                0.000      LITHA
   1     -2.000  27       1.000   3       1.000
PBO, .3H    3          0.00      12.98      0.00      0                0.000      PBO,
   1     -2.000  27       1.000   3       1.330
PB2OCO3     4          4.00      -0.50    -11.46      0                0.000      PB2OC
   1     -2.000  27       2.000   3       1.000  10        1.000
LARNAKIT    4          6.00      -0.28     -6.44      0                0.000      LARNA
   1     -2.000  27       2.000  29       1.000   3        1.000
PB3O2SO4    4          6.00      10.40    -20.75      0                0.000      PB3O2
   1     -4.000  27       3.000  29       1.000   3        2.000
PB4O3SO4    4          6.00      22.10    -35.07      0                0.000      PB4O3
   1     -6.000  27       4.000  29       1.000   3        3.000
CLPYROMO    3          0.00     -84.43      0.00      0                0.000      CLPYR
  27      5.000  26       3.000  13       1.000
HXYPYROM    4          0.00     -62.79      0.00      0                0.000      HXYPY
   1     -1.000  27       5.000  26       3.000   3        1.000
PB3O2CO3    4          4.00      11.02    -26.43      0                0.000      PB3O2
   1     -4.000  27       3.000  10       1.000   3        2.000
PLUMBGUM    5          0.00     -32.79      0.00      0                0.000      PLUMB
   1     -5.000  27       1.000   5       3.000  26        2.000   3        6.000
HINSDALI    6          6.00      -2.50      0.00      0                0.000      HINSD
   1     -6.000  27       1.000   5       3.000  26        1.000  29        1.000
   3      6.000
TSUMEBIT    5          2.00      -9.79      0.00      0                0.000      TSUME
   1     -3.000  27       2.000  15       1.000  26        1.000   3        6.000
PBSIO3      4          0.00       7.32     -9.26      0                0.000      PBSIO
   3     -1.000   1      -2.000  27       1.000  30        1.000
PB2SIO4     3          0.00      19.76    -26.00      0                0.000      PB2SI
   1     -4.000  27       2.000  30       1.000
ANGLESIT    2          6.00      -7.79      2.15      0                0.000      ANGLE
  27      1.000  29       1.000
GALENA      5         -2.00     -48.79     79.54      0                0.000      GALEN
   1      8.000  27       1.000  29       1.000   2        8.000   3       -4.000
PLATTNER    4          2.00      49.30    -70.73      0                0.000      PLATT
   1     -4.000   2      -2.000  27       1.000   3        2.000
PB2O3       4          2.00      61.04      0.00      0                0.000      PB2O3
   1     -6.000   2      -2.000  27       2.000   3        3.000
MINIUM      4          2.00      73.69   -102.76      0                0.000      MINIU
   1     -8.000   2      -2.000  27       3.000   3        4.000
PB(OH)2     3          0.00       8.15    -13.99      0                0.000      PB(OH
   1     -2.000  27       1.000   3       2.000
LAURIONI    4          0.00       0.62      0.00      0                0.000      LAURI
   1     -1.000  27       1.000  13       1.000   3        1.000
```

```
PB2(OH)3    4          0.00       8.79       0.00      0                0.000      PB2(C
   1     -3.000  27        2.000    3        3.000  13        1.000
HYDCERRU    4          8.00     -17.46       0.00      0                0.000      HYDCE
   1     -2.000  27        3.000   10        2.000   3        2.000
PB2O(OH)    3          0.00      26.20       0.00      0                0.000      PB2O(
   1     -4.000  27        2.000    3        3.000
PBBR2       2          0.00      -5.18       8.10      0                0.000      PBBR2
  27      1.000   9        2.000
PBBRF       3          0.00      -8.49       0.00      0                0.000      PBBRF
  27      1.000   9        1.000   16        1.000
PBI2        2          0.00      -8.07      15.16      0                0.000      PBI2
  27      1.000  18        2.000
PB4(OH)6    4          6.00      21.10       0.00      0                0.000      PB4(O
   1     -6.000  27        4.000   29        1.000   3        6.000
NICO3       2          4.00      -6.84      -9.94      0                0.000      NICO3
  25      1.000  10        1.000
NI(OH)2     3          0.00      10.80      30.45      0                0.000      NI(OH
   1     -2.000  25        1.000    3        2.000
NI4(OH)6    4          6.00      32.00       0.00      0                0.000      NI4(O
   1     -6.000  25        4.000   29        1.000   3        6.000
BUNSENIT    3          0.00      12.45     -23.92      0                0.000      BUNSE
   1     -2.000  25        1.000    3        1.000
NI3(PO4)    2          0.00     -31.30       0.00      0                0.000      NI3(P
  25      3.000  26        2.000
MILLERIT    5         -2.00     -41.70      62.64      0                0.000      MILLE
   1      8.000  25        1.000   29        1.000   2        8.000   3      -4.000
RETGERSI    3          6.00      -2.04       1.10      0                0.000      RETGE
  25      1.000  29        1.000    3        6.000
MORENOSI    3          6.00      -2.36       2.94      0                0.000      MOREN
  25      1.000  29        1.000    3        7.000
NI2SIO4     3          0.00      14.54     -33.36      0                0.000      NI2SI
   1     -4.000  25        2.000   30        1.000
AG METAL    2         -1.00     -13.51      25.23      0                0.000      AG ME
   4      1.000   2        1.000
BROMYRIT    2          0.00     -12.27      20.17      0                0.000      BROMY
   4      1.000   9        1.000
CERARGYR    2          0.00      -9.75      15.65      0                0.000      CERAR
   4      1.000  13        1.000
AG2CO3      2          4.00     -11.07       9.53      0                0.000      AG2CO
   4      2.000  10        1.000
AGF.4H2O    3          0.00       0.55       4.27      0                0.000      AGF.4
   4      1.000  16        1.000    3        4.000
IODYRITE    2          0.00     -16.07      26.82      0                0.000      IODYR
   4      1.000  18        1.000
AG2O        3          0.00      12.58     -10.43      0                0.000      AG2O
   1     -2.000   4        2.000    3        1.000
AG3PO4      2          0.00     -17.55       0.00      0                0.000      AG3PO
   4      3.000  26        1.000
ACANTHIT    5         -2.00     -69.71     113.44      0                0.000      ACANT
   1      8.000   4        2.000   29        1.000   2        8.000   3      -4.000
AG2SO4      2          6.00      -4.92       4.25      0                0.000      AG2SO
   4      2.000  29        1.000
ANALCIME    5          0.00       6.72     -22.84      0                0.000      ANALC
  24      1.000   5        1.000   30        2.000   3       -1.000   1      -4.000
HALLOYSI    4          0.00       8.99     -39.73      0                0.000      HALLO
   5      2.000  30        2.000    3        1.000   1       -6.000
AOLINITE    4          0.00       5.73     -35.28      0                0.000      AOLIN
   5      2.000  30        2.000    3        1.000   1       -6.000
LEONHARD    5          0.00      16.49     -85.36      0                0.000      LEONH
   3     -1.000   1      -16.000  11        2.000  30        8.000   5       4.000
```

```
LOW ALBI    5          0.00       2.59     -17.40      0                0.000      LOW A
  24      1.000    5       1.000   30       3.000    1      -4.000    3     -4.000
ANALBITE    5          0.00       3.51     -20.00      0                0.000      ANALB
  24      1.000    5       1.000   30       3.000    1      -4.000    3     -4.000
MUSCOVIT    4          0.00      12.99     -59.34      0                0.000      MUSCO
  19      1.000    5       3.000   30       3.000    1     -10.000
ANNITE      5          6.00      23.29     -65.72      0                0.000      ANNIT
  19      1.000   17       3.000    5       1.000   30       3.000    1    -10.000
ANORTHIT    4          0.00      25.43     -70.66      0                0.000      ANORT
  11      1.000    5       2.000   30       2.000    1      -8.000
PYROPHYL    4          0.00      -1.60       0.00      0                0.000      PYROP
   5      2.000   30       4.000    3      -4.000    1      -6.000
LAUMONTI    4          0.00      14.46     -50.45      0                0.000      LAUMO
  11      1.000    5       2.000   30       4.000    1      -8.000
WAIRAKIT    5          0.00      18.87     -63.15      0                0.000      WAIRA
  11      1.000    5       2.000   30       4.000    1      -8.000    3     -2.000
MALACHIT    4          8.00      -5.18     -15.61      0                0.000      MALAC
  15      2.000    3       2.000   10       1.000    1      -2.000
AZURITE     4         14.00     -16.92     -23.77      0                0.000      AZURI
  15      3.000    3       2.000   10       2.000    1      -2.000
ARSENOLI    4         12.00     -80.58     134.39      0                0.000      ARSEN
   3    -10.000    6       4.000    2       8.000    1       8.000
CLAUDETI    4         12.00     -80.84     133.35      0                0.000      CLAUD
   3    -10.000    6       4.000    2       8.000    1       8.000
ASI3        5          3.00     -15.29      31.89      0                0.000      ASI3
  18      3.000    1       5.000    3      -4.000    6       1.000    2      2.000
ORIPMENT    5          0.00    -200.84     323.34      0                0.000      ORIPM
   1     34.000    3     -20.000    6       2.000    2      28.000   29      3.000
REALGAR     5          0.00     -72.85     120.70      0                0.000      REALG
   1     13.000    2      11.000    3      -8.000    6       1.000   29      1.000
AS2O5       2         10.00       6.70      -5.41      0                0.000      AS2O5
   6      2.000    3      -3.000
ZN(BO2)2    4          0.00       8.29       0.00      0                0.000      ZN(BO
   3     -2.000    1      -2.000   34       1.000    7       2.000
CD(BO2)2    4          0.00       9.84       0.00      0                0.000      CD(BO
   3     -2.000    1      -2.000   12       1.000    7       2.000
PB(BO2)2    4          0.00       7.61      -5.80      0                0.000      PB(BO
   3     -2.000    1      -2.000   27       1.000    7       2.000
MNHPO4(C    3          2.00     -25.40       0.00      0                0.000      MNHPO
  22      1.000   26       1.000    1       1.000
PBHPO4      3          0.00     -23.90       0.00      0                0.000      PBHPO
  27      1.000   26       1.000    1       1.000
PB3(PO4)    2          0.00     -44.50       0.00      0                0.000      PB3(P
  27      3.000   26       2.000
SULFUR      4          0.00     -35.77      55.94      0                0.000      SULFU
   1      8.000    2       6.000   29       1.000    3      -4.000
ALASO4.2    4          5.00       4.80       0.00      0                0.000      ALASO
   5      1.000    6       1.000    3       2.000    1      -3.000
CA3(ASO4    4         10.00      22.30       0.00      0                0.000      CA3(A
  11      3.000    6       2.000    3       4.000    1      -6.000
CU3(ASO4    4         16.00       6.10       0.00      0                0.000      CU3(A
  15      3.000    6       2.000    3       2.000    1      -6.000
FEASO4.2    5          8.00      13.43     -10.00      0                0.000      FEASO
   6      1.000    3       2.000    1      -3.000   17       1.000    2     -1.000
MN3ASO42    4         16.00      12.50       0.00      0                0.000      MN3AS
  22      3.000    6       2.000    3       8.000    1      -6.000
NI3(ASO4    4         10.00      15.70       0.00      0                0.000      NI3(A
  25      3.000    6       2.000    3       8.000    1      -6.000
PB3(ASO4    3         10.00       5.80       0.00      0                0.000      PB3(A
  27      3.000    6       2.000    1      -6.000
```

```
ZN3ASO42    4          10.00      13.65       0.00      0                0.000      ZN3AS
  34      3.000    6       2.000    3       2.500    1      -6.000
BA(ASO4)    3          10.00      -8.91       2.64      0                0.000      BA(AS
   8      3.000    6       2.000    1      -6.000
V METAL     4           0.00      19.74     -18.67      0                0.000      V MET
   2      5.000   33       1.000    1       4.000    3      -2.000
VO          4           2.00      -9.53      16.21      0                0.000      VO
   1      2.000    3      -1.000    2       3.000   33       1.000
VCL2        5           2.00      -4.64       8.43      0                0.000      VCL2
  13      2.000    2       3.000   33       1.000    1       4.000    3      -2.000
V2O3        4           3.00     -17.71      24.51      0                0.000      V2O3
   1      1.000    3      -0.500   33       1.000    2       2.000
V(OH)3      4           3.00     -14.96      44.23      0                0.000      V(OH)
   1      1.000    3       1.000   33       1.000    2       2.000
VCL3        5           3.00      -0.88       0.27      0                0.000      VCL3
  13      3.000   33       1.000    2       2.000    1       4.000    3      -2.000
VOCL        5           3.00     -13.20      18.06      0                0.000      VOCL
  13      1.000    3      -1.000    1       2.000   33       1.000    2       2.000
V2O4        2           4.00     -12.66      15.25      0                0.000      V2O4
  33      1.000    2       1.000
VO(OH)2     3           4.00     -11.08      29.32      0                0.000      VO(OH
   3      1.000   33       1.000    2       1.000
VF4         5           4.00      -2.00     -18.27      0                0.000      VF4
   3     -2.000   16       4.000    1       4.000   33       1.000    2       1.000
VOSO4 (C    5          10.00     -13.36       8.60      0                0.000      VOSO4
  29      1.000   33       1.000    2       1.000    1       2.000    3      -1.000
(VO)3(PO    5           4.00     -25.30      29.32      0                0.000      (VO)3
  26  0.666667   33       1.000    2       1.000    1       2.000    3      -1.000
VOCL2       5           4.00      -4.14       1.12      0                0.000      VOCL2
  13      2.000   33       1.000    2       1.000    1       2.000    3      -1.000
V2O5        3           5.00      -0.72      -4.16      0                0.000      V2O5
   1     -1.000   33       1.000    3       0.500
TYUYAMUN    5          11.00       2.04     -18.30      0                0.000      TYUYA
   1     -4.000   11       0.500   32       1.000   33       1.000    3       2.000
CA-VANAD    4           5.00       2.83     -10.13      0                0.000      CA-VA
   1     -2.000   11       0.500   33       1.000    3       1.000
CA3(VO4)    4           5.00      19.48     -35.07      0                0.000      CA3(V
   1     -4.000   11       1.500   33       1.000    3       2.000
CA2V2O7     4           5.00       8.75     -19.06      0                0.000      CA2V2
   1     -3.000   11       1.000   33       1.000    3       1.500
FE-VANAD    4           6.00      -1.86      -7.37      0                0.000      FE-VA
   1     -2.000   17       0.500   33       1.000    3       1.000
MG-VANAD    4           5.00       5.64     -16.33      0                0.000      MG-VA
   1     -2.000   21       0.500   33       1.000    3       1.000
MG2V2O7     4           5.00      13.18     -30.50      0                0.000      MG2V2
   1     -3.000   21       1.000   33       1.000    3       1.500
MN-VANAD    4           6.00       2.45     -11.05      0                0.000      MN-VA
   1     -2.000   22       0.500   33       1.000    3       1.000
NH4VO3      5           2.00    -116.39     183.28      0                0.000      NH4VO
   1      8.000   33       1.000    3      -2.000   23       1.000    2       8.000
NA-VANAD    4           5.00       3.71      -7.01      0                0.000      NA-VA
   1     -2.000   24       1.000   33       1.000    3       1.000
NA3VO4      4           5.00      36.94     -44.42      0                0.000      NA3VO
   1     -4.000   24       3.000   33       1.000    3       2.000
NA4V2O7     4           5.00      18.70     -24.03      0                0.000      NA4V2
   1     -3.000   24       2.000   33       1.000    3       1.500
PB3(VO4)    4           5.00       3.07      -8.68      0                0.000      PB3(V
   1     -4.000   27       1.500   33       1.000    3       2.000
PB2V2O7     4           5.00      -0.95      -3.22      0                0.000      PB2V2
   1     -3.000   27       1.000   33       1.000    3       1.500
```

```
CARNOTIT    5          11.00        0.23       -8.70       0                  0.000      CARNC
   1     -4.000   19        1.000   32         1.000   33        1.000   3         2.000
AG-VANAD    4           5.00        0.77        0.00       0                  0.000      AG-VA
   1     -2.000    4        1.000   33         1.000    3        1.000
AG2HVO4     4           5.00        1.48        0.00       0                  0.000      AG2HV
   1     -3.000    4        2.000   33         1.000    3        2.000
AG3H2VO5    4           5.00        5.18        0.00       0                  0.000      AG3H2
   1     -4.000    4        3.000   33         1.000    3        3.000
VO2CL       2           5.00        2.81       -9.65       0                  0.000      VO2CL
  33      1.000   13        1.000
V3O5        4          10.00      -48.92       64.43       0                  0.000      V3O5
   1      2.000    3       -1.000    2         5.000   33        3.000
V4O7        4          14.00      -60.58       78.13       0                  0.000      V4O7
   1      2.000    3       -1.000    2         6.000   33        4.000
V6O13       4          26.00      -60.86       64.89       0                  0.000      V6O13
   1     -2.000   33        6.000    3         1.000    2        4.000
LIME        3           0.00       32.80      -46.26       0                  0.000      LIME
   1     -2.000   11        1.000    3         1.000
PORTLAND    3           0.00       22.67      -30.69       0                  0.000      PORTL
   1     -2.000   11        1.000    3         2.000
WUSTITE     4           1.89       11.69      -24.85       0                  0.000      WUSTI
   1     -2.000   17        0.947    3         1.000    2       -0.106
PERICLAS    3           0.00       21.51      -36.13       0                  0.000      PERIC
   1     -2.000   21        1.000    3         1.000
HERCYNIT    4           2.00       27.16      -78.36       0                  0.000      HERCY
   1     -8.000   17        1.000    5         2.000    3        4.000
SPINEL      4           0.00       36.33      -89.09       0                  0.000      SPINE
   1     -8.000   21        1.000    5         2.000    3        4.000
MAG-FERR    5           6.00       42.83      -86.64       0                  0.000      MAG-F
   1     -8.000   21        1.000    3         4.000   17        2.000   2        -2.000
CRYOLITE    3           0.00      -31.49       10.90       0                  0.000      CRYOL
   5      1.000   24        3.000   16         6.000
WOLLASTO    4           0.00       13.00      -19.50       0                  0.000      WOLLA
   3     -1.000    1       -2.000   30         1.000   11        1.000
P-WOLLST    4           0.00       13.85      -21.07       0                  0.000      P-WOL
   3     -1.000    1       -2.000   30         1.000   11        1.000
CA-OLIVI    3           0.00       37.65      -54.69       0                  0.000      CA-OL
   1     -4.000   30        1.000   11         2.000
LARNITE     3           0.00       39.14      -57.24       0                  0.000      LARNI
   1     -4.000   30        1.000   11         2.000
CA3SIO5     4           0.00       73.87     -106.33       0                  0.000      CA3SI
   1     -6.000   30        1.000   11         3.000    3        1.000
MONTICEL    4           0.00       30.27      -49.42       0                  0.000      MONTI
   1     -4.000   30        1.000   11         1.000   21        1.000
AKERMINI    5           0.00       47.47      -76.44       0                  0.000      AKERM
   3     -1.000    1       -6.000   30         2.000   11        2.000   21        1.000
MERWINIT    4           0.00       68.54     -107.11       0                  0.000      MERWI
   1     -8.000   30        2.000   21         1.000   11        3.000
KALSILIT    4           0.00       12.84      -28.92       0                  0.000      KALSI
   1     -4.000   30        1.000    5         1.000   19        1.000
LEUCITE     5           0.00        6.42      -22.08       0                  0.000      LEUCI
   3     -2.000    1       -4.000   30         2.000    5        1.000   19        1.000
MICROCLI    5           0.00        0.62      -12.31       0                  0.000      MICRO
   3     -4.000    1       -4.000   30         3.000    5        1.000   19        1.000
H SANIDI    5           0.00        1.06      -14.25       0                  0.000      H SAN
   3     -4.000    1       -4.000   30         3.000    5        1.000   19        1.000
NEPHELIN    4           0.00       14.22      -33.20       0                  0.000      NEPHE
   1     -4.000   30        1.000    5         1.000   24        1.000
GEHLENIT    5           0.00       56.82     -116.13       0                  0.000      GEHLE
   1    -10.000    5        2.000   30         1.000   11        2.000    3        3.000
```

```
LEPIDOCR   4          3.00      14.40     -10.00      0                0.000      LEPID
   1    -3.000    3       2.000  17        1.000    2      -1.000
NA-NONTR   7          6.00      11.56     -20.00      0                0.000      NA-NO
   1    -7.320    3      -2.680   5        0.330   24       0.330   30       3.670
  17     2.000    2      -2.000
K-NONTRO   7          6.00      10.51     -20.00      0                0.000      K-NON
   1    -7.320    3      -2.680   5        0.330   19       0.330   30       3.670
  17     2.000    2      -2.000
CA-NONTR   7          6.00       5.17     -20.00      0                0.000      CA-NO
   1    -7.320    3      -2.680   5        0.330   11       0.165   30       3.670
  17     2.000    2      -2.000
MG-NONTR   7          6.00       5.47     -20.00      0                0.000      MG-NO
   1    -7.320    3      -2.680   5        0.330   21       0.165   30       3.670
  17     2.000    2      -2.000
FE(OH)3S   4          3.00      15.70     -10.00      0                0.000      FE(OH
   3     3.000    1      -3.000  17        1.000    2      -1.000
HYDROXYA   4          0.00     -39.38     -38.92      0                0.000      HYDRO
  11     5.000   26       3.000   3        1.000    1      -1.000
FLUORAPA   3          0.00     -61.30     -14.77      0                0.000      FLUOR
  11     5.000   26       3.000  16        1.000
PREHNITE   4          0.00      33.63     -78.04      0                0.000      PREHN
  11     2.000    5       2.000  30        3.000    1     -10.000
PHILLIPS   6          0.00       1.95       0.00      0                0.000      PHILL
  24     0.500   19       0.500   5        1.000   30       3.000    1      -4.000
   3    -3.000
ILLITE     6          0.00      12.12     -49.79      0                0.000      ILLIT
  19     0.600   21       0.250   5        2.300   30       3.500    1      -8.000
   3    -2.000
MONTMORI   5          0.00       8.62     -47.99      0                0.000      MONTM
  11     0.170    5       2.330  30        3.670    1      -7.330    3      -2.670
CHLORITE   5          0.00      66.74    -148.51      0                0.000      CHLOR
  21     5.000    5       2.000  30        3.000    3       6.000    1     -16.000
CHLORT-M   7          2.19      49.11      -0.70      0                0.000      CHLOR
  30     2.970    5       2.470  21        3.240   17       1.060    3       6.000
   1   -16.080    2      -0.070
CHLORT-M   7          1.77      53.94      -2.10      0                0.000      CHLOR
  30     2.990    5       2.400  21        3.520   17       0.780    3       6.000
   1   -16.010    2      -0.210
CHLORT-F   6          6.58      22.80       0.00      0                0.000      CHLOR
  30     2.470    5       3.130  17        3.290   21       1.050    3       8.100
   1   -18.070
CHLORT-F   7          5.58      24.06      -1.20      0                0.000      CHLOR
  30     2.840    5       2.910  17        2.730   21       1.160    3       6.640
   1   -16.630    2      -0.120
NA2SO3     5          4.00       4.95      -2.96      0                0.000      NA2SO
  24     2.000   29       1.000   1        2.000    2       2.000    3      -1.000
K2SO3      5          4.00       8.21      -2.18      0                0.000      K2SO3
  19     2.000   29       1.000   1        2.000    2       2.000    3      -1.000
CASO3.2H   5          4.00      -3.48       3.05      0                0.000      CASO3
  11     1.000    3       1.000  29        1.000    1       2.000    2       2.000
CASO3.5H   5          4.00      -3.14      -0.40      0                0.000      CASO3
  11     1.000    3      -0.500  29        1.000    1       2.000    2       2.000
MGSO3      5          4.00       6.50     -18.41      0                0.000      MGSO3
  21     1.000   29       1.000   1        2.000    2       2.000    3      -1.000
BASO3      5          4.00      -5.37       4.40      0                0.000      BASO3
   8     1.000   29       1.000   1        2.000    2       2.000    3      -1.000
AG2SO3     5          4.00     -10.18      18.77      0                0.000      AG2SO
   4     2.000   29       1.000   1        2.000    2       2.000    3      -1.000
CH4(GAS)   4         -4.00     -41.08      61.00      0                0.000      CH4(G
  10     1.000    2       8.000   1       10.000    3      -3.000
```

```
CO2(GAS)    3          4.00     -18.16      0.53      0              0.000     CO2(G
  10      1.000    1       2.000    3     -1.000
O2(GAS)     3          4.00      83.12    -136.63    0              0.000     O2(GA
   3      2.000    1      -4.000    2     -4.000
ND(OH)3S    3          0.0       18.87      0.0      0              0.000     ND(OH
  36       1.0      1      -3.0      3       3.0
ND(OH)3R    3          0.0       15.59     -11.66    0              0.000     ND(OH
  36       1.0      1      -3.0      3       3.0
ND2CO3)3    2          4.0      -33.0       0.0      0              0.000     ND2CO
  36       2.0     10       3.0
CAMOO4      2          0.0       -7.72      0.7      0              0.000     CAMOO
  11       1.0     35       1.0
BAMOO4      2          0.0       -7.46      3.0      0              0.000     BAMOO
   8       1.0     35       1.0
NAT. SE     4          0.0      -60.92     83.25     0              0.000     NAT.
   3      -3.0      2      -4.0     37     -1.0      1     -5.0
FERROSEL    5          0.0     -125.03    170.19     0              0.000     FERRO
   3      -6.0      1      10.0     37      2.0      2     10.0     17     1.000
THOH4       3          0.0      +12.60                0              0.000
  38       1.0      3       4.0      1     -4.0
THO2        3          0.0       +6.30                0              0.000
  38       1.0      3       2.0      1     -4.0
THHPO42H    4          0.0      -51.56                0              0.000
  38       1.0     26       2.0      1      2.0      3      4.0
THF4        2          0.0      -30.17                0              0.000
  38       1.0     16       4.0
THSO42      2         12.0      -20.35                0              0.000
  38       1.0     29       2.0

END
```